

Institut für Meteorologie und Klimatologie  
der Universität Hannover

# **Entwicklung des Monte-Carlo- Strahlungstransfermodells Promt**

von  
**Ulrich Hamann**

Diplomarbeit im Fach Meteorologie  
Februar 2005

# Inhaltsverzeichnis

<b>Abbildungsverzeichnis</b>	<b>vi</b>
<b>1 Einleitung</b>	<b>1</b>
1.1 Einordnung in den allgemeinen wissenschaftlichen Rahmen . . . . .	1
1.2 Ziele der Diplomarbeit . . . . .	2
1.3 Gliederung der Arbeit . . . . .	3
<b>2 Grundlagen des Strahlungstransfers</b>	<b>4</b>
2.1 Grundlegende Größen der Strahlung . . . . .	4
2.2 Rayleigh-Streuung . . . . .	5
2.2.1 Anisotropiefaktor . . . . .	8
2.3 Mie-Theorie . . . . .	9
2.4 Verbreiterung der Absorptionslinien . . . . .	13
2.4.1 Lorentz-Verbreiterung . . . . .	13
2.4.2 Doppler-Verbreiterung . . . . .	14
2.4.3 Voigt-Profil . . . . .	15
2.5 Strahlungstransfergleichung . . . . .	15
2.6 Modelle zur Simulation des Strahlungstransfers . . . . .	16
2.6.1 Ein-dimensionale Modelle . . . . .	16
2.6.2 Drei-dimensionale Modelle . . . . .	17
2.6.3 Wahl des geeigneten Simulationsverfahrens . . . . .	18
<b>3 Entwicklung von Promt</b>	<b>19</b>
3.1 Erste Version: Promt-Rayleigh . . . . .	19
3.1.1 <i>control</i> -Datei . . . . .	20
3.1.2 Modellgebiet . . . . .	20
3.1.3 Simulation des Photonenfluges . . . . .	21
3.1.3.1 Startposition und -richtung . . . . .	21
3.1.3.2 Herleitung des potentiellen Weges . . . . .	21
3.1.3.3 Anwendung des potentiellen Weges . . . . .	23
3.1.3.4 Simulation eines Streuprozesses . . . . .	24
3.1.4 Berechnung und Ausgabe des Ergebnisses . . . . .	26
3.1.4.1 Relative spektrale Bestrahlungsstärke . . . . .	27
3.1.4.2 Spektrale Bestrahlungsstärke . . . . .	28
3.1.4.3 Integration der spektralen Bestrahlungsstärke . . . . .	28
3.1.4.4 Steuerung der Ergebnisausgabe . . . . .	29
3.2 Simulation der Absorption . . . . .	30
3.2.1 Berechnung des Absorptionskoeffizienten . . . . .	30

3.2.1.1	Beschreibung der Routinen von Scheirer . . . . .	30
3.2.1.2	Implementierung in Promt . . . . .	32
3.2.1.3	Erweiterung der Absorption durch Ozon . . . . .	32
3.2.2	Gewicht der Photonen . . . . .	33
3.2.3	Erweiterung der Ausgabe . . . . .	34
3.3	Simulation der Wolken . . . . .	34
3.3.1	Wolkenfelder . . . . .	35
3.3.2	Berechnung der optischen Eigenschaften von Wolken . . . . .	36
3.3.2.1	Komplexer Brechungsindex von Wasser . . . . .	37
3.3.2.2	Mie-Rechnung . . . . .	38
3.3.3	Berücksichtigung der Wolken beim Photonenflug . . . . .	40
3.4	Reflektion am Boden . . . . .	41
3.4.1	Berücksichtigung des Untergrundes beim Photonenflug . . . . .	41
3.5	Programmstruktur . . . . .	42
3.6	Parallelisierung . . . . .	45
<b>4</b>	<b>Modellergebnisse und -verifikation</b>	<b>46</b>
4.1	Horizontal homogene Rechnungen . . . . .	47
4.1.1	Rayleigh-Streuung . . . . .	47
4.1.2	Absorption durch Gase . . . . .	48
4.1.2.1	Mittelungsverfahren des Absorptionskoeffizienten . . . . .	48
4.1.2.2	Absorption ohne Ozon . . . . .	50
4.1.2.3	Absorption inklusive Ozon . . . . .	51
4.1.3	Homogene Wolkenschichten . . . . .	54
4.1.3.1	Streuung durch Wolken . . . . .	54
4.1.3.2	Absorption durch Wolken . . . . .	57
4.1.4	Albedo . . . . .	58
4.1.5	Zusammenfassung der horizontal homogenen Vergleiche . . . . .	60
4.2	Horizontal inhomogene Rechnungen . . . . .	60
4.2.1	Drei-dimensionale Wolkenfelder . . . . .	61
4.2.1.1	Vergleich der monochromatischen Simulationen . . . . .	61
4.2.1.2	Vergleich der solar integrierten Simulationen . . . . .	64
4.2.1.3	Weitere Simulationsergebnisse . . . . .	65
4.2.2	Inhomogene Albedo . . . . .	66
4.3	Simulationsgenauigkeit gegenüber Rechenzeit . . . . .	67
4.3.1	Benötigte Rechenzeit . . . . .	67
4.3.2	Simulationsgenauigkeit . . . . .	69
4.3.3	Beispiel einer Rechenzeitabschätzung . . . . .	72
4.3.4	Parallelisierung . . . . .	72
<b>5</b>	<b>Weiterentwicklung von Promt</b>	<b>74</b>
5.1	Verbesserung der Modellphysik . . . . .	74
5.2	Erweiterungen der Modellphysik . . . . .	76
5.3	Validierung von Promt . . . . .	78
5.4	Modelloptimierung . . . . .	78
5.4.1	Photonenzahl . . . . .	78
5.4.2	Streuung . . . . .	79
5.4.2.1	Bestimmung der Streurichtung . . . . .	79

5.4.2.2	Drehung des mitgeführten Systems . . . . .	79
5.4.3	Absorption . . . . .	80
5.4.3.1	Optimierung des bestehenden Verfahrens . . . . .	80
5.4.3.2	Die correlated-k-Methode . . . . .	81
5.5	Methode der Parallelisierung . . . . .	82
<b>6</b>	<b>Mögliche Anwendungsgebiete</b>	<b>83</b>
6.1	Einfluss von Wolken auf die Turbulenz der bodennahen Grenzschicht	83
6.2	Einfluss von Aerosolen auf den Strahlungstransfer . . . . .	84
6.3	Biologische Anwendung . . . . .	85
6.4	Fernerkundung von Wolken . . . . .	86
<b>7</b>	<b>Zusammenfassung</b>	<b>87</b>
<b>A</b>	<b>Verwendete Symbole</b>	<b>90</b>
<b>B</b>	<b>Beispiel einer control Datei</b>	<b>92</b>



# Abbildungsverzeichnis

2.1	Veranschaulichung der Geometrie der Strahldichte . . . . .	5
2.2	Veranschaulichung des Rayleigh-Streuprozesses . . . . .	7
2.3	Rayleigh-Phasenfunktion . . . . .	8
2.4	Rayleigh-Streuquerschnitte im Vergleich . . . . .	9
2.5	diskrete Energielevel der Absorption . . . . .	13
2.6	Verbreiterung von Absorptionslinien . . . . .	14
3.1	Simulation des Photonenfluges im Modell Prompt-Rayleigh . . . . .	22
3.2	Flug des Photons bis zum Streuprozess . . . . .	24
3.3	Geometrie des Streuprozesses . . . . .	25
3.4	solares Spektrum . . . . .	28
3.5	HITRAN-Datenbank . . . . .	31
3.6	Absorptionsquerschnitt von Ozon . . . . .	33
3.7	komplexer Brechungsindex von Wasser . . . . .	37
3.8	Extinktionseffizienz . . . . .	38
3.9	Phasenfunktion der Mie- und der Rayleigh-Streuung . . . . .	39
3.10	Einfachstreu-Albedo . . . . .	40
3.11	Programmstruktur von Prompt . . . . .	43
3.12	Schematische Darstellung der Simulation des Photonenfluges . . . . .	44
4.1	spektraler Transmissionsgrad, Rayleigh-Streuung . . . . .	47
4.2	Mittelungsverfahren des Absorptionsquerschnitts . . . . .	49
4.3	spektraler Transmissionsgrad, Absorption ohne Ozon . . . . .	51
4.4	Bestrahlungsstärke, Absorption inklusive Ozon . . . . .	52
4.5	Berechnung der Erythem-wirksamen Bestrahlungsstärke . . . . .	53
4.6	spektraler Transmissionsgrad, Streuung durch Wolken . . . . .	55
4.7	spektraler Transmissionsgrad und Streueffizienz . . . . .	56
4.8	spektraler Transmissionsgrad, Absorption durch Wolkenwasser . . . . .	57
4.9	Strahlungsüberhöhung . . . . .	59
4.10	Flüssigwassergehalt eines LES-Wolkenfeldes . . . . .	61
4.11	zwei-dimensionales Feld des spektralen Transmissionsgrads . . . . .	62
4.12	spektraler Transmissionsgrad, Differenz Prompt - MYSTIC . . . . .	63
4.13	Profile der relativen Bestrahlungsstärken . . . . .	64
4.14	zwei-dimensionales Feld der Bestrahlungsstärke . . . . .	65
4.15	Strahlungsüberhöhung nahe einer Eiskante . . . . .	67
4.16	CPU-Zeit in Abhängigkeit des Sonnenzenitwinkels . . . . .	68
4.17	CPU-Zeit in Abhängigkeit der Wolkenschichtdicke . . . . .	70
4.18	CPU-Zeit in Abhängigkeit der Prozessoranzahl . . . . .	73

5.1	Albedo von Gras . . . . .	76
5.2	<i>correlated-k</i> -Methode . . . . .	81

# Kapitel 1

## Einleitung

### 1.1 Einordnung in den allgemeinen wissenschaftlichen Rahmen

Die Simulation des Strahlungstransfers ist in vielen wissenschaftlichen Bereichen von großem Interesse. Die differentielle solare Einstrahlung ist der Antrieb für die Wind- und Wettersysteme und bestimmt das Klima der Erde. Daher ist die korrekte Darstellung des Transfers solarer Strahlung und der Wärmestrahlung der Erde eine wichtige Voraussetzung für realistische Zirkulationsmodelle der Atmosphäre. Die Einstrahlung der Sonne ist essentiell für das Leben auf der Erde. Im sichtbaren Bereich ist sie Voraussetzung für die Photosynthese, jedoch kann die solare Strahlung auch schädliche Auswirkungen auf Organismen haben, insbesondere im UV-Bereich. Die Strahlung der Sonne kann auch technisch beispielsweise zur Produktion von umweltverträglichem Solarstrom genutzt werden. Für alle beschriebenen Anwendungen ist die exakte Simulation des Strahlungstransfers von großem Interesse.

Strahlungstransfermodelle sind weiterhin auch Grundlage von Fernerkundungsverfahren. Durch Messung der spektralen Strahldichte werden Informationen über die Atmosphäre oder die Erdoberfläche gewonnen. Dazu werden spektrale Bereiche betrachtet, die möglichst geringfügig von anderen Größen beeinflusst werden. Jedoch bleibt die Interpretation des gemessenen Signals eine äußerst schwierige Aufgabe, da häufig keine eindeutige Lösung bestimmt werden kann, sondern mehrere Zustände, beispielsweise verschiedene vertikale Verteilungen der zu messenden Größe, die gemessene Strahldichte hätten erzeugen können.

Detailliertes Wissen über den Strahlungstransfer ist auch für die Klimaforschung von Nutzen. Kleine Änderungen der Strahlungsbilanz, wie beispielsweise durch eine Zunahme von Treibhausgasen verursacht, können große Folgen auf das Klima- und Ökosystem der Erde haben.

Insbesondere Wolken haben einen großen Einfluss auf den Strahlungstransfer. Viele Fernerkundungsverfahren können bei Bewölkung nicht oder nur sehr eingeschränkt eingesetzt werden. In der Klimaforschung wird untersucht, ob und welche Wechselwirkungen zwischen Wolkenbildung und Strahlungstransfer bestehen. Auf der einen Seite wird die konvektive Wolkenbildung durch solare Einstrahlung angetrieben, im Gegenzug beeinflusst das Wolkenfeld den Strahlungstransfer und somit die Einstrahlung.

In dieser Diplomarbeit soll ein Beitrag zu der Erforschung des Einflusses von Wolken auf den Strahlungstransfer geleistet werden. Dabei konnte auf Vorarbeiten von vielen exzellenten Wissenschaftlern aufgebaut werden: Zum einen wurde eine Vielzahl von Methoden entwickelt, um den Strahlungstransfer zu simulieren. Ein Überblick wird in Kapitel 2.6 gegeben. Je leistungsfähiger die Computer und je komplexer die Modelle wurden, desto komplexere Wolkenformen konnten untersucht werden. McKee und Cox [40] untersuchten 1974 den Einfluss einer einzelnen isolierten homogenen Wolke auf den Strahlungstransfer, insbesondere die Strahlungsbilanz an den Außenseiten der Wolke. In den 80er und 90er Jahren wurde von zahlreichen Autoren, unter anderem McKee und Klehr [40], Welch und Zdunkowski [69] und Welch und Wielicki [68] der Einfluss von Wolken mit unterschiedlichen Formen wie Quader, Zylinder oder Halbkugel auf den Strahlungstransfer untersucht. O'Hirok und Gautier [44] simulierten 1998 den Strahlungstransfer für tropische Wolkenfelder, deren Strukturen aus NOAA-Satellitenbildern abgeleitet wurden. Neben der Wolkenform sind auch die optischen Eigenschaften der Wolke variabel, so untersuchte Cairns [9] 2000 Wolken mit horizontal variabler Extinktion. Bei der Berücksichtigung des Strahlungstransfers in Klimamodellen stellt sich ein neuer Anspruch. Nicht Simulationen für einzelne Wolkenfelder, sondern statistische Mittel über viele Wolkenfelder sind hier von Interesse. Dazu werden statistische Verfahren entwickelt, deren Rechenzeit kleiner ist als die einer großen Anzahl von Einzelsimulationen, die notwendig sind, um ein entsprechendes statistisches Mittel zu berechnen. Kassianov [25] verglich 2001 für eine große Anzahl von Wolkenfeldern ein statistisches Strahlungstransfermodell mit einem Monte-Carlo-Modell. Er untersuchte den Strahlungstransfer für Wolkenfelder, die auf drei Arten gewonnen wurden. Erstens mithilfe eines stochastischen Modells, zweitens aus der Berechnung eines Large-Eddy-Simulations (LES)-Modells und drittens aus Satellitenmessungen des Multiangle-Imaging Spectro-Radiometer. Dieser Überblick über die Modellierung des Strahlungstransfers in Bezug auf Wolken kann aufgrund der Vielzahl der in diesem Bereich geleisteten Arbeiten nicht vollständig sein. Er skizziert jedoch die Entwicklung der Forschung und zeigt, dass die Strahlungsmodellierung ein aktuelles und innovatives Forschungsgebiet ist.

## 1.2 Ziele der Diplomarbeit

Im Rahmen dieser Diplomarbeit soll ein Monte-Carlo-Modell entwickelt werden, das den Transfer von solarer, unpolarisierter Strahlung durch eine plan-parallele Atmosphäre unter Berücksichtigung

- der Rayleigh-Streuung,
- der Absorption durch Gase, insbesondere Ozon,
- der Streuung und Absorption durch Wolken und
- der Albedo

simuliert. Insbesondere soll es möglich sein, den Strahlungstransfer für eine dreidimensionale niedrige Kumulusbewölkung zu simulieren, welche durch das parallelisierte LES Modell PALM (siehe S. 35) generiert wird. Weiterhin soll das Monte-Carlo-Modell parallelisiert werden. Diese Diplomarbeit ist eine notwendige Vorarbeit für Untersuchungen zu Wechselwirkungen zwischen Wolkenbildung und Strahlungstransfer, siehe Abschnitt 6.1. Das in dieser Arbeit entwickelte Monte-

Carlo-Strahlungstransfer-Modell trägt den Namen Prompt: Program for Monte Carlo simulation of radiative transfer.

## 1.3 Gliederung der Arbeit

Im 2. Kapitel *Grundlagen des Strahlungstransfers* wird die Theorie der zur Entwicklung von Prompt notwendigen Grundlagen des Strahlungstransfers behandelt: die Theorie der Rayleigh- und Mie-Streuung, die Verbreiterung von Absorptionslinien und die Strahlungstransfergleichung (RTE englisch: *radiative transfer equation*). Im Folgenden wird ein Überblick über aktuell verwendete Verfahren gegeben, die unterschiedliche numerische Näherungen zur Lösung der RTE nutzen und somit auf Modellatmosphären unterschiedlicher Komplexität angewandt werden können. Im letzten Abschnitt wird erläutert, warum das Monte-Carlo-Verfahren für diese Arbeit am geeignetsten ist.

Im 3. Kapitel *Entwicklung von Prompt* wird das Entstehen des Modells und die konkrete Realisierung der Simulation von Streuung und Absorption mithilfe des Monte-Carlo-Verfahrens beschrieben. Die erste Version Prompt-Rayleigh simuliert den Strahlungstransfer, der ausschließlich durch Rayleigh-Streuung beeinflusst wird. Das Programm wird schrittweise so erweitert, dass auch Absorption, Wolken und Reflektion am Untergrund in der Simulation berücksichtigt werden. Anschließend wird die Struktur des Programms und die Parallelisierung von Prompt beschrieben. Im 4. Kapitel *Modellergebnisse und -verifikation* werden die Ergebnisse von Prompt diskutiert und mit Ergebnissen anderer Modelle verglichen. Eine Reihe von Simulationen wird durchgeführt, bei denen eine horizontal homogene Atmosphäre angenommen wird. Daher können vergleichbare Simulationen mit dem ein-dimensionalen Modell *libRadtran* (englisch: *library for radiative transfer calculations*) durchgeführt werden. Des Weiteren werden Simulationen für ein durch PALM erzeugtes Wolkenfeld und Simulationen unter Berücksichtigung eines inhomogenen Untergrunds präsentiert, die mit Ergebnissen von anderen Monte-Carlo-Modellen verglichen werden. Das Ergebnis von Monte-Carlo-Simulationen ist aufgrund der stochastischen Natur des Verfahrens mit einer Simulationsunsicherheit behaftet, die durch Verwendung großer Photonenzahlen verkleinert werden kann. Dies kostet jedoch Rechenzeit. Der Zusammenhang zwischen Photonenzahl, Rechenzeit und Genauigkeit des Simulationsergebnisses wird im letzten Abschnitt des Kapitels erläutert.

Im 5. Kapitel *Weiterentwicklung des Modells* wird ein Überblick über mögliche Verbesserungen und Erweiterungen der Modellphysik und Möglichkeiten zur Optimierung von Prompt bezüglich der Rechenzeit gegeben.

Im 6. Kapitel *Mögliche Anwendungsgebiete* werden Vorschläge zur weiteren Verwendung von Prompt skizziert: Erstens die Untersuchung der Wechselwirkungen zwischen Wolkenbildung und Strahlungstransfer, zweitens Untersuchungen zum direkten und indirekten Aerosoleffekt und drittens die Simulation der spektralen Einstrahlung im komplexen Gelände und deren Auswirkung auf Organismen.

Nach der *Zusammenfassung* und *Danksagung* befindet sich im *Anhang* eine Liste der verwendeten Symbole und ein Beispiel für eine *control*-Datei, mithilfe derer Einstellungen für Simulationsläufe von Prompt festgelegt werden können.

# Kapitel 2

## Grundlagen des Strahlungstransfers

Die meiste Energie wird in Form von elektromagnetischer Strahlung durch die Atmosphäre transportiert. Sie wird dabei zum Teil von Luftmolekülen, Aerosolen und Hydrometeoren gestreut oder absorbiert. In diesem Kapitel werden die zur Darstellung dieser Phänomene benötigten Grundlagen beschrieben.

Im ersten Abschnitt wird die Rayleigh-Streuung hergeleitet. Sie wird in Promt verwendet, um die Streuung an Luftmolekülen zu simulieren. Der zweite Abschnitt fasst die Mie-Theorie zusammen, die aus den Maxwell-Gleichungen Streu- und Absorptionsquerschnitte sphärischer Körper ableitet. Sie wird in Promt genutzt, um die optischen Eigenschaften von Wolkentröpfchen zu bestimmen. Der dritte Abschnitt beschreibt die spektrale Verbreiterung der Absorptionslinien. Im vierten Abschnitt wird die Strahlungstransfergleichung eingeführt. Im letzten Abschnitt wird ein Überblick über Strahlungstransfermodelle gegeben und diskutiert, warum die Monte-Carlo-Methode für die in dieser Diplomarbeit angestrebten Simulationen am besten geeignet ist.

### 2.1 Grundlegende Größen der Strahlung

Die Grundlagen des Strahlungstransfers sind allgemein gut bekannt, beispielsweise [33],[34], jedoch werden in der Literatur zum Teil unterschiedliche Symbole verwendet. Daher werden die Definitionen der grundlegenden Größen nochmal mit der in dieser Arbeit verwendeten Schreibweise wiederholt.

Eine elektromagnetische Welle transportiert eine Strahlungsenergie  $E$  (englisch: *radiant energy*), die Einheit ist  $J$ . Der Strahlungsfluss  $\Phi$  ist die emittierte, transportierte oder absorbierte Strahlungsenergie  $dE$  pro Zeitintervall  $dt$ .  $\Phi$  wird in  $W = J/s$  angegeben.

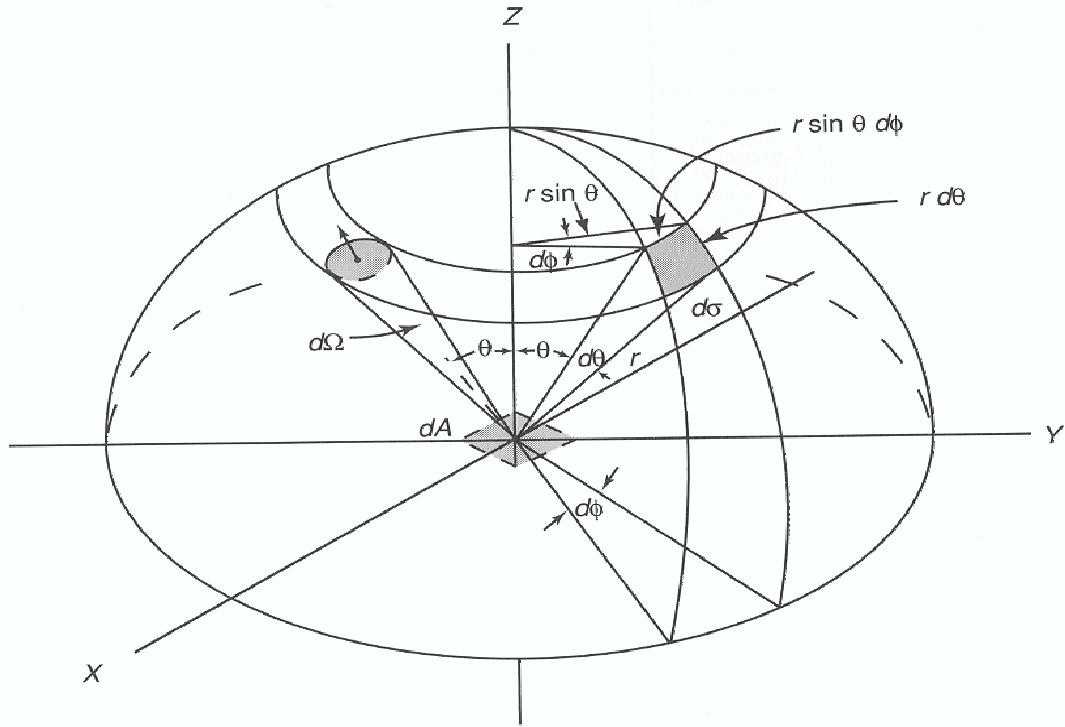
$$\Phi = \frac{dE}{dt} \quad (2.1)$$

Die Bestrahlungsstärke oder Strahlungsflussdichte  $F$  (englisch: *irradiance* oder *flux density*) ist der Strahlungsfluss  $d\Phi$  durch eine beliebige Fläche  $dA$ . Die Einheit der Bestrahlungsstärke  $F$  ist  $W/m^2$ .

$$F = \frac{d\Phi}{dA} \quad (2.2)$$

Die Strahldichte  $I$  (englisch *radiance*) ist definiert als Strahlungsfluss  $d\Phi$ , der durch eine zur Ausbreitungsrichtung der Strahlung orthogonal stehenden Fläche  $dA$  in eine Richtung  $d\Omega = \sin\theta d\theta d\phi$  tritt. Ist die Fläche  $A'$  nicht orthogonal, so wird nur die Projektion der Fläche  $dA = dA' \cos\theta$  durchströmt, wobei  $\theta$  der Winkel zwischen der Ausbreitungsrichtung der Strahlung und der Flächennormalen ist, siehe Abbildung 2.1. Die Einheit der Strahldichte ist  $W/(m^2 sr)$ .

$$I = \frac{d^2\Phi}{d\Omega dA \cos\theta} \quad (2.3)$$



**Abbildung 2.1:** Die Strahldichte  $I$  ist der Strahlungsfluss  $d\Phi$ , der in einem Winkel  $\theta$  aus einer Richtung  $d\Omega$  eine Fläche  $dA$  durchströmt, [34].

Der Zusammenhang zwischen der Bestrahlungsstärke  $F$  und der Strahldichte  $I$  ist also folglich

$$F = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi I(\theta, \phi) \cos\theta \sin\theta d\theta d\phi, \quad (2.4)$$

wobei der Term  $\cos\theta$  aus der unterschiedlichen Definition der durchströmten Flächen, der Term  $\sin\theta$  jedoch aus der Darstellung des Integrals in Kugelkoordinaten stammt. Alle eingeführten Größen  $X = E, \Phi, F$  und  $I$  sind Funktionen der Wellenlänge  $\lambda$ . Die Ableitung einer dieser Größe nach  $\lambda$  wird als spektrale oder monochromatische Größe bezeichnet und mit dem Index  $\lambda$  gekennzeichnet

$$X_\lambda = \frac{dX}{d\lambda}. \quad (2.5)$$

## 2.2 Rayleigh-Streuung

Die Rayleigh-Theorie beschreibt den Streuprozess einer elektromagnetischen Welle an einem sphärischen Teilchen, das wesentlich kleiner als die Wellenlänge  $\lambda$

ist. In der Atmosphäre sind dies vor allem Luftmoleküle. Im Folgenden wird der Rayleigh-Streuquerschnitt  $\sigma_R$  sowie die Phasenfunktion  $P_R(\cos \theta_s)$ , die die Richtungsabhängigkeit der gestreuten Strahlung beschreibt, in den Grundzügen nach Liou [34], jedoch in modifizierter Form hergeleitet.

Die Wellenlänge  $\lambda$  der einfallenden Welle ist wesentlich größer als der Durchmesser des streuenden Partikels, daher erzeugt sie auf der Größenskala des betrachteten Partikels ein homogenes elektrisches Feld  $\vec{E}$ ,

$$\vec{E} = \vec{E}_0 e^{-i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)} \quad (2.6)$$

wobei  $\vec{k}$  der Wellenvektor mit  $|\vec{k}| = k = \frac{2\pi}{\lambda}$ ,  $\vec{r}$  der Ortsvektor und  $\omega = ck$  die Kreisfrequenz der Wellen und  $c$  die Lichtgeschwindigkeit ist.  $\vec{E}$  induziert in Abhängigkeit von der Suszeptibilität  $\chi$  des Partikels ein Dipolmoment  $\vec{p}$  im Partikel, das sich am Ort  $\vec{r}_p$  befindet

$$\vec{p} = \chi \vec{E} = \chi \vec{E}_0 e^{-i(\vec{k}\vec{r}_p - \omega t)}. \quad (2.7)$$

Ein oszillierender Dipol  $\vec{p}$  strahlt nach Helmholtz wiederum eine eigene elektromagnetische Welle ab. Die elektrische Feldstärke der gestreuten Welle  $\vec{E}_s$  ist am Ort des Partikels

$$\vec{E}_s(\vec{r}_p) = \frac{1}{c^2} \frac{1}{r} \frac{\partial^2 \vec{p}}{\partial t^2} \sin \gamma, \quad (2.8)$$

wobei  $\gamma$  der Winkel zwischen der Richtung des Dipols und der Ausbreitungsrichtung der gestreuten Strahlung ist. Aus den Gleichungen (2.7) und (2.8) folgt

$$\vec{E}_s = -\vec{E}_0 \frac{e^{-i(\vec{k}_s(\vec{r} - \vec{r}_p) + \vec{k}\vec{r}_p - \omega t)}}{r} k^2 \chi \sin \gamma, \quad (2.9)$$

wobei  $\vec{k}_s$  der Wellenvektor der gestreuten Welle ist. Nach dem Superpositionsprinzip ist es möglich, das wirkende elektrische Feld in zwei Komponenten aufzuteilen

$$\vec{E}_0 = \vec{E}_{0r} + \vec{E}_{0l}, \quad (2.10)$$

wobei  $\vec{E}_{0l}$  in der Ebene liegt, die durch die Ausbreitungsrichtung der eingestrahnten und gestreuten Strahlung aufgespannt wird, und  $\vec{E}_{0r}$  senkrecht auf dieser Ebene steht. Die von ihnen induzierten Dipole seien  $\vec{p}_l$  und  $\vec{p}_r$ . Abbildung 2.2 zeigt, dass der Winkel  $\gamma_1$  zwischen  $\vec{p}_r$  und der Streurichtung immer gleich  $\pi/2$  ist, hingegen der Winkel  $\gamma_2$  zwischen  $\vec{p}_l$  und der Streurichtung variieren kann. Der Winkel zwischen der Richtung der einfallenden Welle und der Streurichtung wird als Streuwinkel  $\theta_s$  bezeichnet. Es gilt  $\gamma_2 = \pi/2 - \theta_s$ .

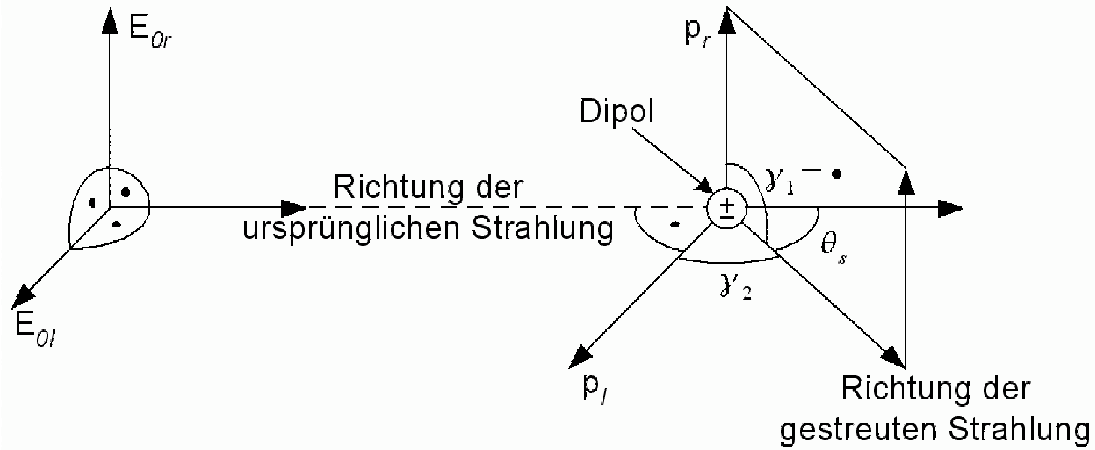
Das elektrische Feld der gestreuten Welle ist folglich

$$\vec{E}_s = \begin{pmatrix} E_r \\ E_l \end{pmatrix} = -\frac{e^{-i(\vec{k}_s(\vec{r} - \vec{r}_p) + \vec{k}\vec{r}_p - \omega t)}}{r} k^2 \chi \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \cos \theta_s \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{0r} \\ E_{0l} \end{pmatrix} \quad (2.11)$$

Unpolarisierte Strahlung hat keine ausgezeichnete Richtung in Bezug auf die Streuebene, daher gilt  $I_{0l} = I_{0r} = I_0/2$ , wobei die Intensität  $I$  proportional zum Quadrat der elektrischen Feldstärke  $\vec{E}$  ist. Nach Gleichung (2.11) ist folglich die Intensität im unpolarisierten Fall

$$I = \frac{I_0}{r^2} \chi^2 \left( \frac{2\pi}{\lambda} \right)^4 \frac{1 + \cos^2 \theta_s}{2} \quad (2.12)$$





**Abbildung 2.2:** Eine von links einfallende elektromagnetische Welle, deren elektrische Feldstärke durch zwei Anteile  $\vec{E}_{0i}$  und  $\vec{E}_{0r}$  dargestellt werden kann, induziert in einem Luftpartikel einen Dipolmoment. Der schwingende Dipol strahlt nun selbst eine elektromagnetische Welle aus, die gestreute Strahlung, [34] modifiziert.

Die Phasenfunktion  $P_R(\cos \theta_s)$  beschreibt die richtungsabhängige Verteilung der gestreuten Energie. Sie wird wie folgt normiert:

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi \frac{P_R(\cos \theta_s)}{4\pi} \sin \theta_s d\theta_s d\phi_s = 1 \quad (2.13)$$

Wird diese Normierung auf den richtungsabhängigen Term von Gleichung (2.12) angewandt, erhält man die Phasenfunktion der Rayleigh-Streuung  $P_R(\cos \theta_s)$

$$P_R(\cos \theta_s) = \frac{3}{4}(1 + \cos^2 \theta_s). \quad (2.14)$$

Abbildung 2.3 illustriert die Phasenfunktion für die Rayleigh-Streuung für unterschiedliche Ausrichtungen des einfallenden  $\vec{E}$ -Vektors in Bezug auf die Streuebene.

Weiterhin wird der Streuquerschnitt  $\sigma_R$  nach

$$I(\theta_s) = I_0 \left( \frac{\sigma_R}{r^2} \right) \frac{P_R(\cos \theta_s)}{4\pi} \quad (2.15)$$

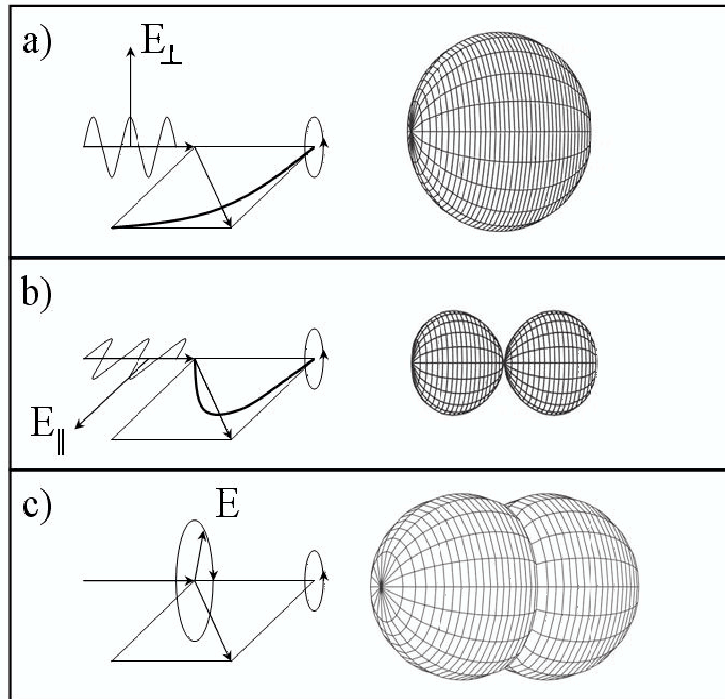
definiert. Für die Rayleigh-Streuung ergibt sich mit  $k = \frac{2\pi}{\lambda}$

$$\sigma_R = \frac{16\pi}{3} \chi^2 \left( \frac{2\pi}{\lambda} \right)^4 \quad (2.16)$$

Die Suszeptibilität  $\chi$  der Luft ist von ihrer Dichte und der betrachteten Wellenlänge abhängig. In der Literatur sind hierzu unterschiedliche Angaben zu finden. Liou [34] und Lenoble [33] berechnen den Streuquerschnitt  $\sigma_R$  nach

$$\sigma_R = \frac{8\pi^3 (m_r - 1)^2}{3\lambda^4} \frac{6 + 3\delta}{6 - 7\delta} \frac{n}{n_s^2} \quad (2.17)$$

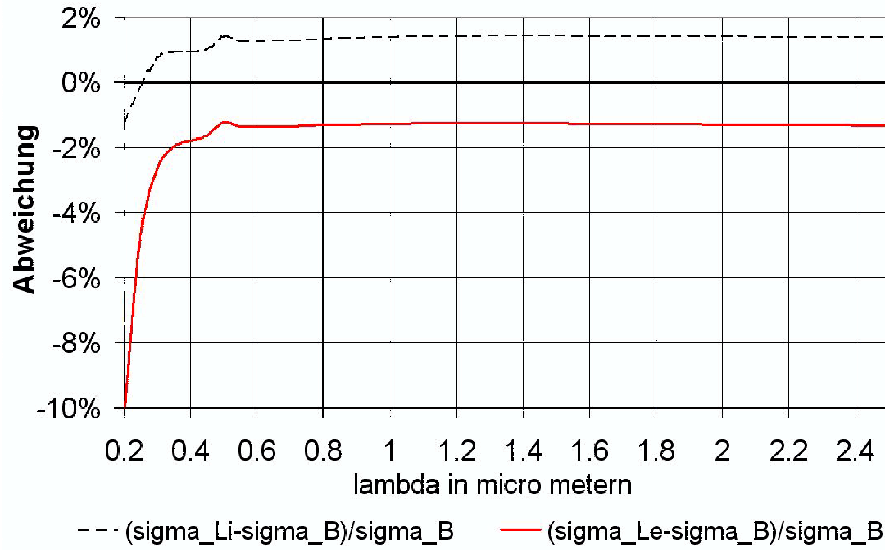
wobei  $m_r$  der Realteil des Brechungsindex,  $n$  die Teilchendichte und  $n_s$  die Teilchendichte der Luft unter Standardbedingungen ist. Der Term  $(6 + 3\delta)/(6 - 7\delta)$  berücksichtigt die Anisotropie der Suszeptibilität der Luftmoleküle, wobei  $\delta$  der Anisotropiefaktor ist.



**Abbildung 2.3:** In dieser Abbildung wird die Strahldichte-Verteilung der Rayleigh-Streuung für unpolarisierte Strahlung illustriert. Die betrachtete Strahlung kommt hierbei von links. In der Streuebene liegen die Ausbreitungsrichtungen der Strahlung vor und nach der Streuung. Die linke Seite der Abbildungen zeigt die Position der elektrischen Feldstärke  $\vec{E}$  der einfallenden Strahlung zur Streuebene. Sie symbolisiert daher nur die Streuung in der horizontalen Ebene. Da die Strahlung unpolarisiert ist, ist jede Ausrichtung der Streuebene bezüglich der Rotation um die ursprüngliche Ausbreitungsrichtung gleich wahrscheinlich. In Abbildung a) steht der elektrische Feldvektor  $\vec{E}$  orthogonal auf der Streuebene. Die Verteilung der Strahldichte ist isotrop. In Abbildung b) liegt der elektrische Feldvektor  $\vec{E}$  in der Streuebene. Es wird keine Strahlung orthogonal zur ursprünglichen Ausbreitungsrichtung gestreut. In Abbildung c) sind die beiden Anteile der gestreuten Strahlung überlagert. Die Abbildung unten rechts ist daher eine drei-dimensionale Darstellung der Phasenfunktion der Rayleigh-Streuung für unpolarisierte Strahlung, [34] (modifiziert).

### 2.2.1 Anisotropiefaktor

Da die genaue Größe des Rayleigh-Streuquerschnitts von entscheidender Bedeutung für die Strahlungstransfer-Simulation ist, wird dieser nach dem Verfahren von drei Autoren Liou [34], Lenoble [33] und Bucholtz [5] berechnet und verglichen. Alle drei Autoren verwenden einen *wellenlängenabhängigen Brechungsindex*. Jedoch sind die Angaben zu dem Anisotropiefaktor unterschiedlich. Lenoble schreibt, dass  $(6 + 3\delta)/(6 - 7\delta)$  je nach Autor zwischen 1.023 und 1.048 liegt. Liou gibt einen *wellenlängenunabhängigen Wert des Anisotropiefaktors* von  $\delta = 0.035$  an, dies ist äquivalent zu  $(6 + 3\delta)/(6 - 7\delta) = 1.061$ . Bucholtz hingegen berücksichtigt den Anisotropiefaktor als *wellenlängenabhängige Größe*. Die Abbildung 2.4 zeigt die prozentuale Differenz der berechneten Streuquerschnitte, wobei der Streuquerschnitt nach Bucholtz als Referenz verwendet wird. Bei der Berechnung nach Lenoble wird nach ihren Angaben der größtmögliche Wert für  $(6 + 3\delta)/(6 - 7\delta) = 1.048$  angenommen. Die Abweichung der Streuquerschnitte, die in Abbildung 2.4 dargestellt wird, liegt in der Größenordnung von einigen Prozent. Die Wellenlängenabhängig-



**Abbildung 2.4:** Zur Berechnung des Rayleigh-Streuquerschnitts sind in der Literatur verschiedene Angaben zu finden. Das Diagramm zeigt den prozentualen Unterschied zwischen Rayleigh-Streukoeffizienten, die nach Liou (Index  $L_i$ ) [34], Lenoble (Index  $L_e$ ) [33] und nach Bucholtz (Index  $B$ ) [5] berechnet werden, [eigene Abbildung].

keit des Anisotropiefaktors zeigt sich besonders deutlich bei kürzeren Wellenlängen. Da beim Ansatz von Bucholtz die Wellenlängenabhängigkeit des Anisotropiefaktors berücksichtigt wird, wird der Rayleigh-Streuquerschnitt  $\sigma_R$  in Promt nach seinen Angaben berechnet.

## 2.3 Mie-Theorie

Das Kapitel gibt die Herleitung der Mie-Theorie nach Liou [34] in verkürzter Form wieder.

Die Ausbreitung von elektromagnetischen Wellen wird im Allgemeinen durch die Maxwell-Gleichungen beschrieben. Die magnetische Permeabilität  $\mu$  unterscheidet sich für die meisten Materialien nur unwesentlich von eins, und wird daher hier  $\mu \approx 1$  gesetzt. Für den Fall, dass keine Ladung und somit auch keine elektrischen Ströme im betrachteten Volumen sind, lassen sich die Maxwell-Gleichungen in folgender Form darstellen

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (2.18)$$

$$\nabla \times \vec{B} = \frac{\varepsilon}{c} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \quad (2.19)$$

$$\nabla \cdot \vec{E} = 0 \quad (2.20)$$

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0, \quad (2.21)$$

wobei  $\nabla$  der Nabla-Operator,  $\vec{B}$  die magnetische Flussdichte,  $\vec{E}$  die elektrische Feldstärke,  $t$  die Zeit und  $\varepsilon$  die Dielektrizitätskonstante ist. Es wird der Ansatz

einer zeitlich periodischen Welle gewählt.

$$\vec{B} \rightarrow \vec{B}e^{i\omega t} = \vec{B}e^{ickt} \quad (2.22)$$

$$\vec{E} \rightarrow \vec{E}e^{i\omega t} = \vec{E}e^{ickt} \quad (2.23)$$

wobei  $\omega$  die Kreisfrequenz und  $k = 2\pi/\lambda$  die Wellenzahl ist. Bildet man die Rotation von den Gleichungen (2.19) und (2.18) und führt die zeitliche Ableitung unter Berücksichtigung des Wellenansatzes (2.22) und (2.23) aus, so erhält man die Differentialgleichungen

$$\nabla^2 \vec{B} = -k^2 m^2 \vec{B} \quad (2.24)$$

$$\nabla^2 \vec{E} = -k^2 m^2 \vec{E} \quad (2.25)$$

wobei  $m = \sqrt{\varepsilon}$  der komplexe Brechungsindex ist. Aufgrund der Symmetrie des Problems wird ein Ansatz in Kugelkoordinaten gewählt, um die Lösung der Differentialgleichungen (2.24) und (2.25) zu finden. Sind  $u$  und  $v$  zwei unabhängige Lösungen der skalaren Differentialgleichung

$$\nabla^2 \psi = -k^2 m^2 \psi, \quad (2.26)$$

so erfüllen die Ansätze

$$\vec{B} = m(-\vec{M}_u + i\vec{N}_v) \quad (2.27)$$

$$\vec{E} = \vec{M}_v + i\vec{N}_u \quad (2.28)$$

die vektorielle Differentialgleichung (2.24) bzw (2.25).  $\vec{M}$  und  $\vec{N}$  sind hierbei zwei Vektorfunktionen, die von den skalaren Funktionen  $u$  und  $v$  abhängen.

$$\vec{M}_\psi = \nabla \times [\hat{e}_r(r\psi)] \quad (2.29)$$

$$mk\vec{N}_\psi = \nabla \times \vec{M}_\psi \quad (2.30)$$

wobei  $\hat{e}_r$  der Einheitsvektor in radialer Richtung ist.

Mithilfe eines Separationsansatzes

$$\psi(r, \phi_s, \theta_s) = R(r) \Theta(\theta_s) \Phi(\phi_s) \quad (2.31)$$

lässt sich eine Lösung für die Funktion  $\psi$  ermitteln.

$$\psi(r, \phi_s, \theta_s) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{l=-n}^n P_n^l(\cos \theta_s) [\gamma_n \psi_n(kmr) + \delta_n \chi_n(kmr)] (\alpha_l \cos l\phi_s + \beta_l \sin l\phi_s) \quad (2.32)$$

wobei  $\alpha_l$ ,  $\beta_l$ ,  $\gamma_n$  und  $\delta_n$  noch zu bestimmende Koeffizienten sind.  $P_n^l$  ist das assoziierte Legendre-Polynom und die Funktionen  $\psi_n$  und  $\chi_n$  sind über die Bessel-Funktion  $J_{n+\frac{1}{2}}$  und die Neumann-Funktion  $N_{n+\frac{1}{2}}$  definiert.

$$\psi_n(kmr) = \sqrt{\frac{\pi kmr}{2}} J_{n+\frac{1}{2}}(kmr) \quad (2.33)$$

$$\chi_n(kmr) = -\sqrt{\frac{\pi kmr}{2}} N_{n+\frac{1}{2}}(kmr) \quad (2.34)$$

Der Streuprozess wird durch drei Wellen beschrieben: die einfallende Welle  $\vec{E}^i$ , im Folgenden durch ein hochgestelltes  $i$  (englisch *incident*) gekennzeichnet, die Welle innerhalb des Tropfens  $\vec{E}^t$ , gekennzeichnet durch ein hochgestelltes  $t$  (englisch *transmitted*), und die gestreute Welle  $\vec{E}^s$ , gekennzeichnet durch ein hochgestelltes  $s$  (englisch *scattered*). Für jede Welle wird eine Reihenentwicklung durchgeführt und eine passende Darstellung durch die Funktionen  $\psi_n$  und  $\chi_n$  ausgewählt. Die einfallende Welle wird nur durch die Funktion  $\psi_n$  ausgedrückt, da  $\chi_n$  im Ursprung eine Singularität hat. Breitet sich die einfallende Welle entlang der  $x$ -Achse aus, so lassen sich deren skalare Funktionen  $u^i$  und  $v^i$  in folgenden Reihen entwickeln

$$ru^i = \frac{1}{k} \sum_{n=1}^{\infty} (-i)^n \frac{2n+1}{n(n+1)} \psi_n(kr) P_n^1(\cos \theta_s) \cos \phi_s, \quad (2.35)$$

$$rv^i = \frac{1}{k} \sum_{n=1}^{\infty} (-i)^n \frac{2n+1}{n(n+1)} \psi_n(kr) P_n^1(\cos \theta_s) \sin \phi_s. \quad (2.36)$$

Auch zur Darstellung der Welle innerhalb der streuenden Kugel wird nur  $\psi_n$  verwendet. Aus der Reihenentwicklung folgt

$$ru^t = \frac{1}{mk} \sum_{n=1}^{\infty} (-i)^n \frac{2n+1}{n(n+1)} c_n \psi_n(kmr) P_n^1(\cos \theta_s) \cos \phi_s, \quad (2.37)$$

$$rv^t = \frac{1}{mk} \sum_{n=1}^{\infty} (-i)^n \frac{2n+1}{n(n+1)} d_n \psi_n(kmr) P_n^1(\cos \theta_s) \sin \phi_s, \quad (2.38)$$

wobei  $c_n$  und  $d_n$  noch zu bestimmende Koeffizienten sind. Zur Darstellung der gestreuten Welle wird die Funktion

$$\xi_n = \psi_n + i\chi_n \quad (2.39)$$

verwendet, da diese im Unendlichen gegen Null geht. Die Reihenentwicklung ergibt

$$ru^s = \frac{1}{k} \sum_{n=1}^{\infty} (-i)^n \frac{2n+1}{n(n+1)} a_n \xi_n(kr) P_n^1(\cos \theta_s) \cos \phi_s, \quad (2.40)$$

$$rv^s = \frac{1}{k} \sum_{n=1}^{\infty} (-i)^n \frac{2n+1}{n(n+1)} b_n \xi_n(kr) P_n^1(\cos \theta_s) \sin \phi_s. \quad (2.41)$$

wobei  $a_n$  und  $b_n$  noch zu bestimmende Koeffizienten sind. An der Oberfläche der streuenden Kugel  $r = r_0$  müssen die Tangentialkomponenten des elektrischen und magnetischen Feldes kontinuierlich übergehen<sup>1</sup>.

$$\vec{E}_{\theta_s}^i + \vec{E}_{\theta_s}^s = \vec{E}_{\theta_s}^t \quad (2.42)$$

$$\vec{E}_{\phi_s}^i + \vec{E}_{\phi_s}^s = \vec{E}_{\phi_s}^t \quad (2.43)$$

$$\vec{B}_{\theta_s}^i + \vec{B}_{\theta_s}^s = \vec{B}_{\theta_s}^t \quad (2.44)$$

$$\vec{B}_{\phi_s}^i + \vec{B}_{\phi_s}^s = \vec{B}_{\phi_s}^t \quad (2.45)$$

---

<sup>1</sup>In der Literatur wird häufig das Symbol  $a$  anstelle von  $r_0$  verwendet.

Aus dieser Bedingung lassen sich die Koeffizienten  $c_n$  und  $d_n$  eliminieren, wodurch sich eine konkrete Darstellung der Koeffizienten  $a_n$  und  $b_n$  ergibt

$$a_n = \frac{\psi'_n(y)\psi_n(x) - m\psi_n(y)\psi'_n(x)}{\psi'_n(y)\xi_n(x) - m\psi_n(y)\xi'_n(x)} \quad (2.46)$$

$$b_n = \frac{m\psi'_n(y)\psi_n(x) - \psi_n(y)\psi'_n(x)}{m\psi'_n(y)\xi_n(x) - \psi_n(y)\xi'_n(x)}. \quad (2.47)$$

wobei  $x = kr_0 = 2\pi r_0/\lambda$  als Größenparameter bezeichnet wird und  $y = mx$  ist. Betrachtet man die Lösung der gestreuten Welle für große Entfernungen gegenüber dem Kugelradius, so verschwinden die radialen Komponenten der Welle. Die tangentialen Komponenten sind

$$\vec{E}_{\theta_s}^s = \frac{i}{kr} e^{-ikr} \cos \phi_s S_2(\theta_s) \quad (2.48)$$

$$-\vec{E}_{\phi_s}^s = \frac{i}{kr} e^{-ikr} \sin \phi_s S_1(\theta_s) \quad (2.49)$$

wobei

$$S_1(\theta_s) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2n+1}{n(n+1)} [a_n \pi_n(\cos \theta_s) + b_n \tau_n(\cos \theta_s)] \quad (2.50)$$

$$S_2(\theta_s) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2n+1}{n(n+1)} [b_n \pi_n(\cos \theta_s) + a_n \tau_n(\cos \theta_s)] \quad (2.51)$$

und

$$\pi_n(\cos \theta_s) = \frac{1}{\sin \theta_s} P_n^1(\cos \theta_s) \quad (2.52)$$

$$\tau_n(\cos \theta_s) = \frac{d}{d\theta_s} P_n^1(\cos \theta_s) \quad (2.53)$$

Wird die Abschwächung der Strahldichte in großer Entfernung von der Kugel betrachtet, so ergibt sich die Extinktionseffizienz  $Q_e$

$$Q_e = \frac{2}{x^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) \operatorname{Re}(a_n + b_n), \quad (2.54)$$

die das Verhältnis von Extinktionsquerschnitt zu wahren Querschnitt ist. Das Verhältnis von eingestrahelter Bestrahlungsstärke zu der gestreuten, über den gesamten Raumwinkel integrierten Strahldichte definiert die Streueffizienz  $Q_s$ .

$$Q_s = \frac{2}{x^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) (|a_n|^2 + |b_n|^2) \quad (2.55)$$

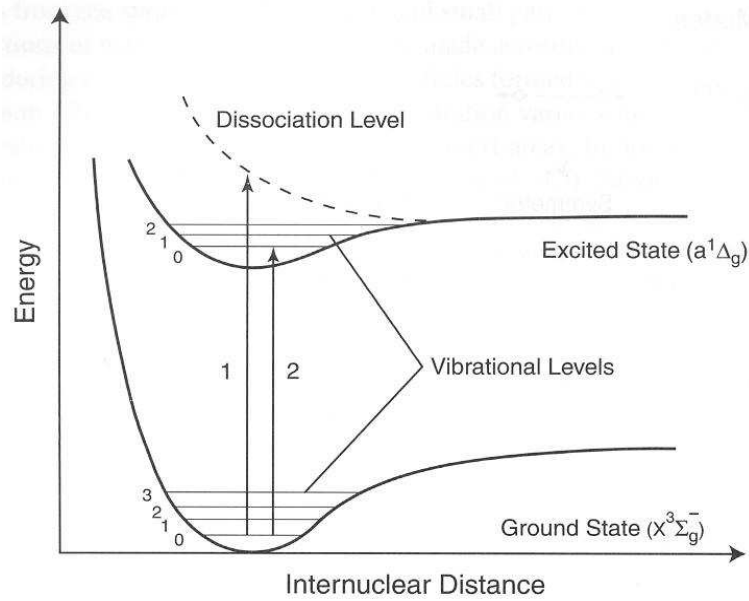
Der Streu-  $\beta_s$  und Absorptionskoeffizient  $k_{abs}$  der Mie-Streuung ergeben sich somit zu

$$\beta_s = Q_s \pi r_0^2 n \quad (2.56)$$

$$k_{abs} = (Q_e - Q_s) \pi r_0^2 n, \quad (2.57)$$

wobei  $n$  die Teilchendichte der betrachteten Kugeln mit dem Radius  $r_0$  ist. Und die Phasenfunktion  $P_M$  der Mie-Streuung ist

$$P_M(\theta_s) = \frac{1}{2x^2 Q_s} (|S_1(\theta_s)|^2 + |S_2(\theta_s)|^2). \quad (2.58)$$



**Abbildung 2.5:** Ein Molekül absorbiert und emittiert diskrete Energiemengen. Dadurch wird die Frequenz der Absorptionslinie festgelegt, [34].

## 2.4 Verbreiterung der Absorptionslinien

Die Absorptionslinien von Molekülen hängen von ihrem Anregungs-, Vibrations- und Rotationszustand ab, siehe Abbildung 2.5. Diese Zustände werden durch die jeweiligen Quantenzahlen beschrieben, die bei der quantenmechanischen Berechnung der Schrödinger-Gleichung hergeleitet werden. Durch eine Zustandsänderung eines Moleküls wird eine diskrete Energiemenge  $E_n = h\nu_n$  aufgenommen, wobei  $h$  das Plancksche Wirkungsquantum ist. Nach dieser Betrachtung wird von jeder Absorptionslinie nur eine diskrete Frequenz absorbiert. Jedoch verbreitern folgende Effekte die Absorptionslinie:

- die gedämpfte Oszillatorschwingung des Absorbers (natürliche Verbreiterung)
- die Kollisionen mit anderen Molekülen (Lorentz-Effekt) und
- der Dopplereffekt, hervorgerufen durch die thermische Geschwindigkeit der absorbierenden Moleküle.

Die natürliche Verbreiterung ist im Vergleich zu den anderen beiden Effekten vernachlässigbar. Abbildung 2.6 veranschaulicht schematisch die Verbreiterung einer Absorptionslinie aufgrund der Doppler- und der Kollisionsverbreiterung.

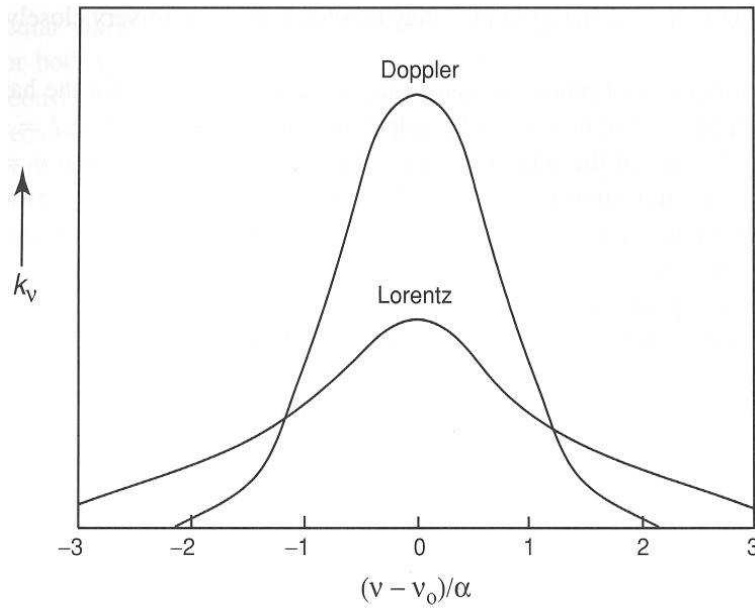
### 2.4.1 Lorentz-Verbreiterung

Ein ungestörtes Molekül emittiert eine harmonische Welle der Frequenz  $\nu_0$

$$f(t) = A \cos \pi \nu_0 ct \quad (2.59)$$

Die Amplitudenverteilung kann mittels der Fouriertransformation ermittelt werden.

$$g(\nu) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^t (A \cos \pi \nu_0 ct') (\cos \pi \nu ct') dt' \quad (2.60)$$



**Abbildung 2.6:** Abbildung einer durch den Lorentz-Effekt und einer durch den Doppler-Effekt verbreiterten Absorptionslinie. Beide Linien besitzen die gleiche Intensität. Die Verbreiterungen haben die gleiche Halbwertsbreite  $\alpha$ , [34].

Durch die Kollision eines absorbierenden Moleküls mit einem anderen Molekül verliert die emittierte Welle ihre Phase, wobei die Wahrscheinlichkeit, dass zwei Moleküle kollidieren, einer Poissonverteilung  $\exp(t/t_0)$  entspricht. Der Absorptionsquerschnitt lässt sich daher mit folgendem Ansatz berechnen

$$\sigma_\nu = A' \int_0^\infty [g(\nu)]^2 \exp(t/t_0) dt, \quad (2.61)$$

wobei  $A'$  eine noch zu bestimmende Konstante ist. Wird  $1/t_0 = 2\pi\alpha_L c$  gesetzt, wobei  $\alpha_L$  die Halbwertsbreite der Lorentz-Verbreiterung ist, folgt aus Gleichung (2.61)

$$\sigma_\nu = \frac{S}{\pi} \frac{\alpha}{(\nu - \nu_0)^2 + \alpha_L^2} := S f_L(\nu - \nu_0), \quad (2.62)$$

wobei die Linie auf die Linienstärke  $S$  normiert wird. Die Funktion  $f_L$  wird *Lorentz-Funktion* und der Effekt *Lorentz-Verbreiterung* oder auch *Druck-Verbreiterung* genannt, da die Halbwertsbreite  $\alpha_L$  von Druck und Temperatur abhängt

$$\alpha_L = \alpha_{L,0} \frac{p}{p_0} \left( \frac{T_0}{T} \right)^n, \quad (2.63)$$

wobei  $\alpha_{L,0}$  die Halbwertsbreite bei dem Referenzdruck  $p_0$  und der Referenztemperatur  $T_0$  ist. Der Wert von  $n$  liegt je nach Molekültyp zwischen  $\frac{1}{2}$  und 1.

### 2.4.2 Doppler-Verbreiterung

Die Geschwindigkeitsverteilung der Brownschen Molekularbewegung entspricht im thermischen Gleichgewicht der Boltzmann-Verteilung

$$p(v) = \sqrt{\frac{m}{2\pi KT}} \exp\left(\frac{-mv^2}{2KT}\right), \quad (2.64)$$



wobei  $K$  die Boltzmann-Konstante ist. Die Frequenz  $\nu_0$  der Absorptionslinie wird aufgrund des Dopplereffekts entsprechend der Geschwindigkeit  $v$  des absorbierenden Moleküls verschoben

$$\nu = \nu_0 \left( 1 \pm \frac{v}{c} \right). \quad (2.65)$$

Wird die Geschwindigkeit  $v$  mithilfe der Gleichung (2.65) in Gleichung (2.64) ersetzt und die erhaltene Wahrscheinlichkeitsverteilung auf die Linienstärke  $S$  normiert

$$\int_0^\infty p(\nu) d\nu = S, \quad (2.66)$$

so erhält man den Absorptionsquerschnitt  $\sigma_\nu$

$$\sigma_\nu = \frac{S}{\alpha_D \sqrt{\pi}} \exp \left( - \left( \frac{\nu - \nu_0}{\alpha_D} \right)^2 \right) =: S f_D(\nu - \nu_0), \quad (2.67)$$

wobei die Funktion  $f_D$  die Doppler-Funktion genannt wird.

### 2.4.3 Voigt-Profil

In der unteren Atmosphäre dominiert die Lorentz-Verbreiterung. In einer Höhe von etwa 20 bis 50 km wird die Verbreiterung der Absorptionslinie jedoch durch beide Phänomene, Lorentz- und Dopplereffekt, maßgeblich bestimmt. Die Form der Absorptionslinie ist daher die Faltung aus Lorentz- und Dopplerfunktion

$$f_V = \int_0^\infty f_L(\nu - \nu') f_D(\nu - \nu_0) d\nu'. \quad (2.68)$$

Dabei wird die Absorptionslinie der Frequenz  $\nu_0$  durch die Lorentz-Verbreiterung auf die Frequenzen  $\nu'$  verschoben. Jede Frequenz  $\nu'$  wird wiederum durch den Dopplereffekt verbreitert und kann zum Absorptionsquerschnitt der betrachteten Frequenz  $\nu$  beitragen. Das Profil der Absorptionslinie  $f_V$  wird Voigt-Profil genannt. Ist der Absorptionsquerschnitt  $\sigma_{abs}$  einer Frequenz  $\nu$  und somit auch für die entsprechende Wellenlänge  $\lambda$  bekannt, so erhält man durch Multiplikation mit der Teilchendichte des Absorbers  $n$  den Absorptionskoeffizienten  $k_{abs}$

$$k_{abs}(\lambda) = n \sigma_{abs}(\lambda). \quad (2.69)$$

Die Herleitung der Absorptionslinien-Verbreiterung stammt aus dem Lehrbuch von Liou [34].

## 2.5 Strahlungstransfergleichung

Die Strahldichte  $I$  durchdringt in Richtung  $\Omega$  ein Medium der optischen Dicke  $d\tau = k_e ds$ , wobei der Extinktionskoeffizient  $k_e$  die Summe aller Streu- und Absorptionskoeffizienten ist. Die Änderung der Strahldichte beim Durchdringen wird durch die Strahlungstransfergleichung (RTE) (englisch *radiative transfer equation*) beschrieben, die sich für eine plan-parallele Atmosphäre in folgender Form schreiben lässt, [34],

$$\frac{1}{\cos \theta} \frac{dI(\tau)}{d\tau} = I - I_{dif} - I_{dir} - I_{emis}. \quad (2.70)$$

$I_{dif}$  ist die diffuse Strahldichte, die aus Richtung  $\Omega'$  in Richtung  $\Omega$  gestreut wird,

$$I_{dif} = \frac{1}{4\pi} \frac{\sigma_s}{\sigma_e} \int_{\Omega} I(\tau, \Omega') P(\Omega, \Omega') d\Omega', \quad (2.71)$$

wobei  $\sigma_s$  der Streu- und  $\sigma_e$  der Extinktionsquerschnitt ist.  $I_{dir}$  ist der Teil der direkten Sonnenstrahlung, der in die betrachtete Richtung  $\Omega$  gestreut wird

$$I_{dir} = \frac{1}{4\pi} \frac{\sigma_s}{\sigma} F_{\odot} P(\Omega, \Omega_{\odot}) e^{\tau \cos \theta_{\odot}}, \quad (2.72)$$

wobei der Index  $\odot$  die Größen der Sonne kennzeichnet. Der Sonnenzenitwinkel  $\theta_{\odot}$  ist der Winkel zwischen Zenit und der Position der Sonne.  $I_{emis}$  schließlich ist die Strahlung, die von der Atmosphäre emittiert wird.

$$I_{emis} = \left(1 - \frac{\sigma_s}{\sigma_e}\right) B(T(\tau)), \quad (2.73)$$

wobei  $B(T(\tau))$  die thermische Emission ist, die von der Temperatur  $T$  der Atmosphäre abhängt. Diese kann sich mit dem Ort und damit mit der optischen Dicke  $\tau$  ändern. Aufgrund der Inhomogenität der Atmosphäre ist eine einfache Lösung der Strahlungstransfer-Gleichung nicht möglich.

## 2.6 Modelle zur Simulation des Strahlungstransfers

Es existiert eine Vielzahl von numerischen Verfahren, um den atmosphärischen Strahlungstransfer zu simulieren. Die Modelle unterscheiden sich vor allem durch die bei der numerischen Diskretisierung der RTE durchgeführten Näherungen und vereinfachenden Annahmen für das Modellgebiet sowie durch ihre Anforderungen an die Rechenzeit. Im ersten Abschnitt wird ein Überblick über ein-dimensionale Modelle gegeben und die *Unabhängige-Säulen-Näherung* beschrieben. Im zweiten Abschnitt werden drei-dimensionale Verfahren zur Simulation des Strahlungstransfers vorgestellt. Im dritten Abschnitt wird diskutiert, welches der Simulationsverfahren für die in der Diplomarbeit gestellte Aufgabe am besten geeignet ist.

### 2.6.1 Ein-dimensionale Modelle

Für viele operative Anwendungen werden wegen des geringen Rechenzeitbedarfs ein-dimensionale Modelle verwendet. Bei diesen wird angenommen, dass die Energie nur vertikal transportiert wird. Es können daher nur horizontal homogene Modellgebiete, insbesondere nur horizontal homogene Wolkenschichten, und ein homogener, ebener Untergrund simuliert werden. Bekannte Verfahren sind die *Zwei-*, *Vier-* und allgemein die *Multi-Stromverfahren*, bei denen die Winkelaufteilung der Strahldichte und der Phasenfunktion diskretisiert werden. Das *delta-Eddington-Verfahren* ist eines der ersten dieser Verfahrensgruppe; häufig verwendet wird das *Diskrete-Ordinaten-Verfahren* von Stamnes [65]. Ein anderer Ansatz ist die *Additions-Methode*, bei der zu Beginn die Transmission von zwei sehr

dünnen Schichten berechnet wird, so dass angenommen werden kann, dass sie homogen sind. Durch Hinzufügen weiterer Schichten kann schrittweise die gesamte Atmosphäre simuliert werden. Ein Sonderfall der Additions-Methode ist die Verdopplungs-Methode, bei der die simulierte Schichtdicke bei jedem Rechenschritt verdoppelt wird. Die mathematische Herleitung der aufgeführten Verfahren kann in Liou [34] nachgelesen werden.

Ein erster Ansatz, horizontale Inhomogenitäten zu berücksichtigen, ist die *Unabhängige-Säulen-Methode* (ICA englisch: *Independent Column Approximation*)<sup>2</sup>. Die Atmosphäre wird hierbei in voneinander unabhängige Säulen eingeteilt, für die jeweils eine ein-dimensionale Transferrechnung durchgeführt wird. Es ist daher möglich, für jede Säule eine unterschiedliche Bewölkung und einen anderen Untergrund zu berücksichtigen, jedoch kann kein Energietransport zwischen den Säulen simuliert werden. Varnai und Davies [67] schlugen vor, nach dem Sonnenstand ausgerichtete, geneigte Säulen zu verwenden, woraus sich die so genannten geneigten ICA-Modelle (TICA englisch: *Tilted ICA*) entwickelten. Hierdurch wird der Fehler, der durch die Unterbindung des Austausches zwischen den Säulen entsteht, bedeutend reduziert, da die Strahldichte in Richtung der direkten Strahlung am größten ist.

### 2.6.2 Drei-dimensionale Modelle

Strukturierte Bewölkung sowie eine räumlich variable Albedo können jedoch nur durch drei-dimensionale Simulationsmethoden erfasst werden. Es existieren verschiedene Ansätze: Das ED3D-Verfahren ist das Delta-Eddington-Verfahren in drei Dimensionen.

Des weiteren entwickelte Evans [14] 1998 eine iterative Methode zur Simulation des drei-dimensionalen Strahlungstransfers namens *SHDOM* (englisch: *spherical-harmonics discrete-ordinate method*). *SHDOM* bedient sich einiger Elemente der Kugeloberflächen-Methode (englisch: *spherical-harmonics*) [13] und der Diskreten-Ordinaten-Methode [54]. *SHDOM* zeichnet sich besonders durch eine hohe Effizienz bei monochromatischen Berechnungen aus, [Evans, persönliche Kommunikation]. Das *discrete-angle-radiative-transfer-Modell* DART diskretisiert die räumliche Verteilung der Strahldichte. Insbesondere die Verwendung von 6 Richtungen ist intuitiv gut vorstellbar, da eine Modellbox ihre 6 benachbarten Modellboxen beeinflussen kann.

Das Monte-Carlo-Verfahren modelliert den Strahlungstransfer, indem es für eine Vielzahl von Photonen den individuellen Flug durch die Atmosphäre simuliert. Da dieses Verfahren statistischer Natur ist, hängt die Genauigkeit des Ergebnisses von der Anzahl der simulierten Photonen ab. In den 70er Jahren wurde es umfassend von Marchuk [36] beschrieben und erstmals zur Simulation des Strahlungstransfers eingesetzt. Ein internationaler Vergleich von drei-dimensionalen Strahlungstransfermodellen wurde 2000 bei dem Intercomparison of 3D Radiation Codes (I3RC) [8] durchgeführt.

---

<sup>2</sup>Es wird äquivalent auch die Bezeichnung *Independent Pixel Approximation* IPA verwendet.

### 2.6.3 Wahl des geeigneten Simulationsverfahrens

Im Rahmen dieser Arbeit soll der Strahlungstransfer durch eine inhomogene Wolkenschicht simuliert werden, daher muss eines der drei-dimensionalen Verfahren angewandt werden. SHDOM ist insbesondere schnell, wenn die Phasenfunktion durch eine Reihenentwicklung mit möglichst wenig Legendre-Koeffizienten dargestellt werden kann [14], vorzugsweise die Henyey-Greenstein-Phasenfunktion [21]. Im Vergleich zum Monte-Carlo-Verfahren ist SHDOM langsamer bei der Bestimmung der Bestrahlungsstärke an den Modellrändern. Das DART-Verfahren erzielt im Vergleich zum Monte-Carlo-Verfahren geringere Genauigkeiten. Es wurde entwickelt, um für operative Anwendungen ein schnelles drei-dimensionales Verfahren zur Verfügung zu haben. Das Monte-Carlo-Verfahren hingegen ermöglicht es, *beliebige drei-dimensionale Wolkenfelder*, somit auch die in dieser Diplomarbeit zu simulierende niedrige Kumulus-Bewölkung sowie *eine räumlich variable Albedo* zu berücksichtigen. Durch die unabhängige Simulation einer großen Anzahl von Photonen ist es gut geeignet, einen großen Wellenlängenbereich, wie den des solaren Spektrums, zu simulieren. Daher können die in dieser Diplomarbeit gestellten Aufgaben am besten durch das Monte-Carlo-Verfahren realisiert werden.

# Kapitel 3

## Entwicklung von Promt

In diesem Kapitel wird die Entwicklung von Promt schrittweise beschrieben. Die erste Version Promt-Rayleigh kann lediglich die Rayleigh-Streuung berücksichtigen. Bei seiner Entwicklung wird das Modellgitter der Atmosphäre festgelegt, das grundlegende Prinzip der Simulation des Photonenfluges entworfen und Routinen zur Ausgabe der Simulationsergebnisse geschrieben. Anschließend wird Promt erweitert, so dass Absorption, Wolken und Bodenalbedo in Simulationen berücksichtigt werden. Für jeden physikalischen Prozess wird beschrieben, wie die in Kapitel 2 vorgestellte Theorie in Promt umgesetzt wird. Im Abschnitt 3.5 wird ein Überblick über die Programmstruktur nach Abschluss aller Erweiterungen gegeben. Nachdem die Programmentwicklung auf einer Prozessoreinheit abgeschlossen ist, wird im letzten Kapitel die Parallelisierung von Promt beschrieben.

### 3.1 Erste Version: Promt-Rayleigh

Zur Simulation der Rayleigh-Streuung muss ein Monte-Carlo-Modell folgendes leisten: Die Modellatmosphäre muss eingelesen und ein Koordinatensystem definiert werden. Der Weg der Photonen durch die Modellatmosphäre muss in Abhängigkeit des Rayleigh-Streukoeffizienten  $\beta_R$  und der Phasenfunktion  $P_R$  simuliert werden. Da der Streukoeffizient von der Wellenlänge abhängig ist<sup>1</sup>, müssen für jede betrachtete Wellenlänge die optischen Eigenschaften berechnet und eine eigene Strahlungstransfer-Simulation durchgeführt werden. Für jede Wellenlänge wird jeweils die Anzahl und die horizontale Verteilung erstens der Photonen bestimmt, die vom Boden absorbiert werden, und zweitens der Photonen, die ins Weltall zurückgestreut werden. Aus ihnen werden die Strahlflussdichten am Boden und am oberen Rand der Atmosphäre berechnet.

Im ersten Abschnitt wird die Bedienung von Promt und die Eingabe von Simulationsparametern mithilfe der *control*-Datei erläutert. Im zweiten Abschnitt 3.1.2 werden die zur Verfügung stehenden Modellatmosphären und das von Promt genutzte Koordinatensystem beschrieben. Der dritte Abschnitt behandelt die Monte-Carlo-Simulation des Photonenfluges unter Berücksichtigung der Rayleigh-Streuung. In letzten Abschnitt wird die Berechnung der Ausgabegrößen beschrieben.

---

<sup>1</sup>In der erweiterten Version von Promt sind auch der Absorptionskoeffizient  $k_{abs}$  und die Mie-Phasenfunktion  $P_M(\cos \theta_s)$  von der Wellenlänge abhängig.

### 3.1.1 *control*-Datei

Der Benutzer kann mithilfe der *control*-Datei Einstellungen für den Simulationslauf vornehmen. Alle Textpassagen, die sich auf die Steuerung von Promt mithilfe der *control*-Datei beziehen, werden im Folgenden durch kursive Schrift hervorgehoben. Anhang B zeigt ein Beispiel für eine *control*-Datei. In dieser Datei wird unter anderem die spektrale Auflösung der Simulation festgelegt, mit der das betrachtete Wellenlängenintervall aufgelöst wird. Weiterhin müssen die Grenzen des zu simulierenden Wellenlängenintervalls durch *lambda\_start* und *lambda\_end* angegeben werden. Promt ist für Simulation des solaren Strahlungstransfers ausgelegt. Die kleinste Wellenlänge, die von Promt simuliert werden kann, ist 250 nm. Promt wurde bis zu einer Wellenlänge von 3000 nm getestet, die Absorptionsdatenbanken beinhalten jedoch auch Daten für größere Wellenlängen. Die spektrale Auflösung der Berechnung wird durch *delta\_lambda* bestimmt. Durch die Zahl *photons* wird angegeben, wieviele Photonen einer Wellenlänge pro horizontale Gitterzelle simuliert werden sollen. Die Anzahl der Photonen wird auf die Anzahl der Gitterzellen  $n_x n_y$  bezogen, da die Genauigkeit des Simulations-Ergebnisses von dieser Photonenanzahl abhängig ist, siehe Abschnitt 4.3.2.

### 3.1.2 Modellgebiet

Zur Berechnung des Rayleigh-Streuquerschnitts muss die Teilchendichte der Luft bekannt sein<sup>2</sup>. In Promt stehen sechs Modellatmosphären nach Anderson [2] zur Auswahl, die von dem Modell *libRadtran* übernommen werden:

- US-Standard Atmosphäre von 1974
- Modellatmosphäre der mittleren Breiten im Sommer
- Modellatmosphäre der mittleren Breiten im Winter
- Modellatmosphäre der subarktischen Breiten im Sommer
- Modellatmosphäre der subarktischen Breiten im Winter
- Modellatmosphäre für tropische Breiten

Sie geben die erforderlichen Profile für verschiedene geographische Breiten und Jahreszeiten an. Die Profile haben eine vertikale Auflösung von 1 km zwischen 0 und 25 km, von 2.5 km zwischen 25 bis 50 km und von 5 km zwischen 50 bis 120 km. Die Höhenlevel der Modellatmosphäre werden im Folgenden als  $z$ -System bezeichnet. Die in der Modellatmosphäre angegebenen Größen sind repräsentativ für die Höhe  $z_i$ . In Promt wird angenommen, dass die Atmosphärenschicht von  $(z_{i-1} + z_i)/2$  bis  $(z_i + z_{i+1})/2$  homogen ist und die für die Höhe  $z_i$  angegebenen Eigenschaften besitzt. Daher wird ein zweites vertikales Koordinatensystem  $zz$  eingeführt

$$zz_i = (z_{i-1} + z_i)/2, \quad (3.1)$$

welches die Grenzen zwischen den homogenen Schichten der Modellatmosphäre angibt.

Das Profil der Modellatmosphäre kann in der *control*-Datei mithilfe der Einstellung *iprof* ausgewählt werden. Die horizontalen Ausmaße des Modellgebiets werden durch die horizontalen Gitterpunktanzahlen  $n_x$  und  $n_y$ , sowie durch deren

---

<sup>2</sup>Zur Berechnung des Absorptionskoeffizienten in den folgenden Versionen von Promt müssen auch das Temperatur- und Druckprofil, sowie die Teilchendichten der absorbierenden Gase vorgegeben werden.

Abstände  $dx$  und  $dy$  bestimmt. Die horizontale Auflösung ist für alle Schichten der Modellatmosphäre identisch.

### 3.1.3 Simulation des Photonenfluges

Prompt-Rayleigh simuliert für eine große Anzahl von Photonen den individuellen Flugweg durch die Atmosphäre. Die Bestimmung der Startposition und anfänglichen Flugrichtung des Photons wird im ersten Abschnitt beschrieben. Das Photon fliegt anschließend gradlinig durch die Atmosphäre, bis es gestreut wird. Die Strecke bis zum nächsten Streuprozess wird mithilfe des potentiellen Weges bestimmt, der im zweiten Abschnitt hergeleitet wird. Im dritten Abschnitt wird beschrieben, wie die Flugstrecke bis zum nächsten Streuprozess mithilfe des potentiellen Weges simuliert wird. Die Simulation des Streuprozesses wird im vierten Abschnitt beschrieben. Abbildung 3.1 zeigt schematisch den Vorgang der Simulation des Photonenfluges von Prompt-Rayleigh.

Für horizontal homogene Rechnungen kann die Option *only\_z* aktiviert werden. In diesem Fall werden beim Photonenflug die Berechnungen in  $x$ - und  $y$ -Richtung zu Gunsten der Rechenzeit übersprungen.

#### 3.1.3.1 Startposition und -richtung

Zu Anfang der Simulation des Photonenfluges wird der Startort des Photons festgelegt. Die Starthöhe der Photonen wird in der *control*-Datei festgelegt. Es wird empfohlen, die Photonen an der oberen Grenze der Modellatmosphären in 120 km Höhe starten zu lassen. Es besteht aber auch die Möglichkeit, einige der oberen Modellschichten zugunsten der Rechenzeit zu vernachlässigen.

Horizontal werden möglichst viele Photonen auf einem regelmäßigen Gitter gestartet, wodurch eine möglichst homogene Bestrahlung am Oberrand des Modellgebietes erreicht wird. Sollte die vom Nutzer gewählte Photonenanzahl nicht auf ein regelmäßiges Gitter passen, so werden die restlichen Photonen von einer zufälligen horizontalen Position aus gestartet.

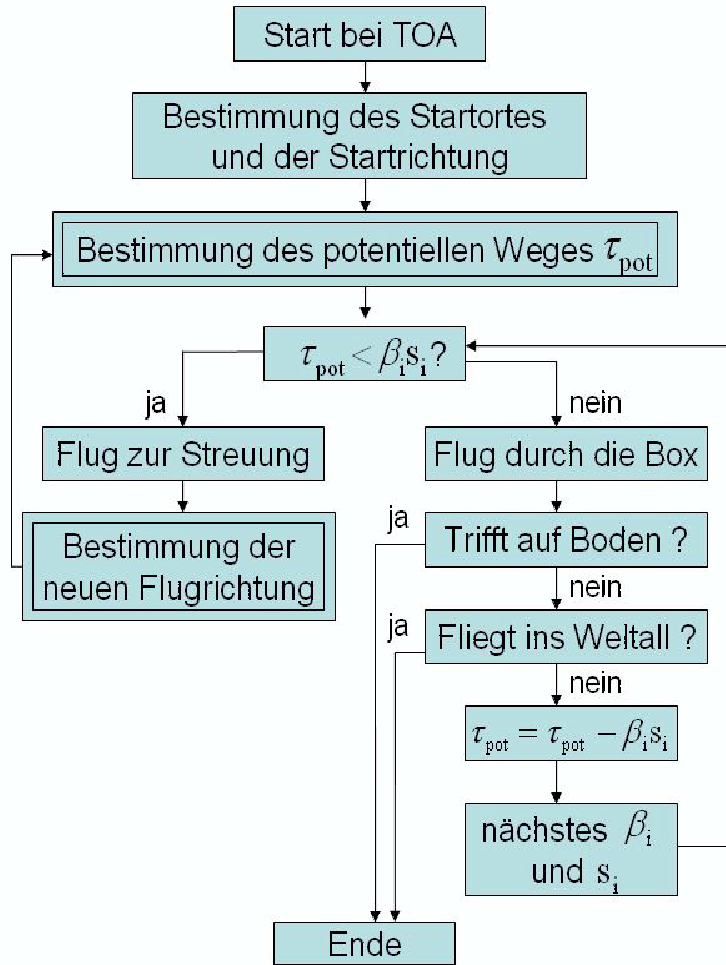
Anschließend wird die Flugrichtung des Photons beim Start nach der Position der Sonne ( $\theta_\odot, \phi_\odot$ ) berechnet. Die Flugrichtung wird durch einen auf eins normierten Vektor  $(a, b, c)$  ausgedrückt.

$$\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \phi_\odot \sin \theta_\odot \\ \sin \phi_\odot \sin \theta_\odot \\ \cos \theta_\odot \end{pmatrix} \quad (3.2)$$

#### 3.1.3.2 Herleitung des potentiellen Weges

Das Photon startet seinen Flug und fliegt gradlinig durch die Boxen<sup>3</sup> der Atmosphäre, bis es zu einem Streuprozess kommt. Der Weg bis zum Streuprozess ist abhängig von dem Streukoeffizienten  $\beta_s$  entlang des zurückgelegten Weges. In Prompt-Rayleigh wird nur Rayleigh-Streuung berücksichtigt, daher ist in diesem Fall der Streukoeffizient  $\beta_s$  gleich dem Rayleigh-Streukoeffizient  $\beta_R$ . Der Streukoeffizient der Rayleigh-Streuung  $\beta_R$  ist das Produkt von Streuquerschnitt  $\sigma_R$ , der

<sup>3</sup>Im Folgenden wird ein Volumen der Modellatmosphäre, dass als homogen angenommen wird, als Box bezeichnet, siehe Abbildung 3.2.



**Abbildung 3.1:** Schematischer Überblick der Simulation des Photonenfluges im Modell Promt-Rayleigh, in dem ausschließlich Rayleigh-Streuung berücksichtigt wird. Der potentielle Weg  $\tau_{pot}$  wird um das Produkt von Streukoeffizienten  $\beta_i$  der Box  $i$  und dem in ihr zurückgelegten Weg  $s_i$  verkleinert. Wenn  $\tau_{pot} = 0$  ist, wird ein Streuprozess simuliert. Die doppelt eingerahmten Kästchen beinhalten einen Simulationsschritt, der mithilfe einer Zufallszahl bestimmt wird. *TOA* steht für *Top Of the Atmosphere*, [eigene Abbildung].

in Promt nach Bucholtz [5] berechnet wird, und Teilchendichte der Luft  $n$ , die für jede Atmosphärenschicht aus der ausgewählten Modellatmosphäre entnommen wird.

$$\beta_R = \sigma_R n \quad (3.3)$$

Um die Flugstrecke des Photons bis zum nächsten Streuprozess zu bestimmen, wird in Monte-Carlo-Modellen die Methode des potentiellen Weges angewendet [55], [37]. Der potentielle Weg leitet sich aus der Abschwächung der Strahldichte  $I$ , die ein Medium mit dem Streukoeffizienten  $\beta_s$  durchdringt, ab.

$$dI = -\beta(s)I(s)ds \quad (3.4)$$

Der Streukoeffizient ist dabei eine Funktion des Weges  $s$ . Die Differentialgleichung lässt sich durch Separation der Variablen lösen.

$$\frac{I(\tau)}{I_0} = e^{-\int_0^\tau \beta_s(s')ds'} = e^{-\tau_s} \quad (3.5)$$



wobei  $\tau_s$  die optische Dicke der Streuung ist.

$$\tau_s = \int_0^s \beta_s(s') ds' \quad (3.6)$$

Das Verhältnis der Strahldichte  $I(\tau_s)$  zur ursprünglichen Strahldichte  $I_0$  wird bei der Monte-Carlo-Methode als Wahrscheinlichkeit aufgefasst, dass ein Photon, ohne gestreut zu werden, bis zur optischen Dicke  $\tau_s$  vordringt. Wird diese mit einer Zufallszahl  $RN$  gleichgesetzt

$$RN = I(\tau_s)/I_0 = e^{-\int_0^s \beta(s') ds'}, \quad (3.7)$$

so folgt daraus eine Darstellung der optischen Dicke  $\tau_{pot}$ , in die das Photon ohne Streuprozess vordringt, die im statistischen Mittel die grundlegende Physik exakt repräsentiert

$$\int_0^s \beta(s') ds' = -\ln(RN) := \tau_{pot}. \quad (3.8)$$

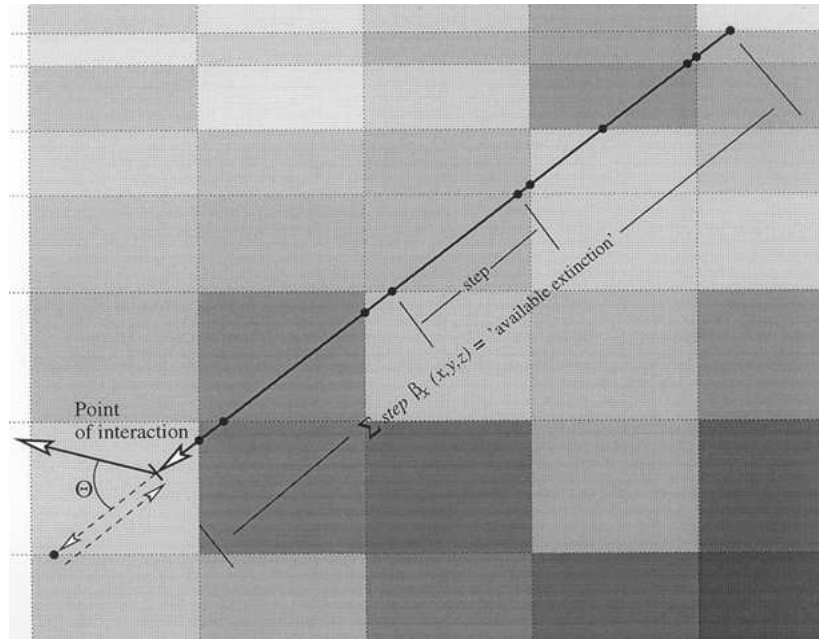
Durch diese Gleichung wird der potentielle Weg  $\tau_{pot}$  definiert und seine Berechnung beschrieben. Da die Modellatmosphäre im Prompt durch homogene Schichten repräsentiert wird, kann das Integral auf der linken Seite von Gleichung (3.8) durch eine Summe approximiert werden.

$$\int_0^s \beta(s') ds' \approx \sum_i \beta_i s_i \quad (3.9)$$

### 3.1.3.3 Anwendung des potentiellen Weges

Die Flugstrecke des Photons bis zum nächsten Prozess wird wie folgt simuliert: Der potentielle Weg des Photons wird nach Gleichung (3.8) bestimmt. Anschließend wird die optische Dicke  $d\tau_{pot} = \beta_i s_i$  der nächsten zu durchfliegenden Box  $i$  bestimmt, wobei  $s_i$  die zurückzulegende Strecke innerhalb der Box ist. Falls  $d\tau_{pot}$  kleiner als der potentielle Weg  $\tau_{pot}$  ist, durchfliegt das Photon diese Box, vom potentiellen Weg wird  $d\tau_{pot}$  subtrahiert, der Streukoeffizient der nächsten Box wird herausgesucht und es wird für die nächste Box ermittelt, ob  $\tau_{pot}$  größer als  $d\tau_{pot}$  ist. Falls  $d\tau_{pot}$  jedoch größer ist als der momentane Rest des potentiellen Weges, kommt es innerhalb der Box zum Streuprozess. Abbildung 3.2 veranschaulicht für zwei Dimensionen die Simulation des Photonenfluges bis zum ersten Streuprozess. Beim Eintritt in die nächste Box müssen folgende Sonderfälle berücksichtigt werden:

- Das Photon verlässt das Modellgebiet über einen seitlichen Rand. Es werden in diesem Fall zyklische Randbedingungen angenommen, das Photon kommt an der gegenüberliegenden Stelle wieder in das Modellgebiet. Für wenige Spezialfälle, bei denen die Ausbreitungsrichtung der direkten Strahlung orthogonal auf den Flächennormalen der reflektierenden Ränder steht, können auch reflektierende Randbedingungen angenommen werden. *Die Steuerung der Randbedingungen erfolgt mit den Parametern  $x\_boundary$  und  $y\_boundary$  der control-Datei.*
- Das Photon trifft auf den Oberrand des Modellgebietes. Der Ort des Entweichens ins Weltall wird gespeichert. Die Simulation des Fluges dieses Photons ist zu Ende.



**Abbildung 3.2:** Die optische Dicke entlang des Photonenweges wird vom potentiellen Weg abgezogen. Die Schattierung der Boxen symbolisiert die Größe ihres Streukoeffizienten. Sobald der potentielle Weg Null wird, wird ein Streuprozess simuliert, [55].

- Das Photon trifft auf den Unterrand des Modellgebietes. Der Ort des Auftreffens auf den Untergrund wird gespeichert. Die Simulation des Fluges dieses Photons ist zu Ende.

### 3.1.3.4 Simulation eines Streuprozesses

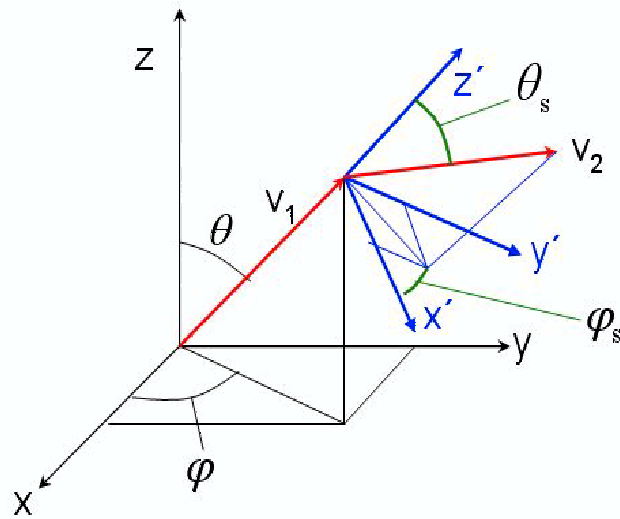
Sobald das Inkrement des optischen Weges  $d\tau_{pot}$  größer als der Rest des potentiellen Weges  $\tau_{pot}$  ist, kommt es innerhalb der Box zur Streuung. Das Photon fliegt entsprechend dem Rest des potentiellen Weges  $\tau_{pot}$  bis zum Ort der Streuung innerhalb der Box.

$$\begin{pmatrix} x_{i+1} \\ y_{i+1} \\ z_{i+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_i + \tau_{pot} a/\beta(x, y, z) \\ y_i + \tau_{pot} b/\beta(x, y, z) \\ z_i + \tau_{pot} c/\beta(x, y, z) \end{pmatrix} \quad (3.10)$$

Zur Bestimmung der Flugrichtung nach dem Streuprozess  $(a_{i+1}, b_{i+1}, c_{i+1})$  wird die Phasenfunktion  $P_R(\cos \theta)$  der Rayleigh-Streuung verwendet, siehe Gleichung (2.14). Durch sie lässt sich die Wahrscheinlichkeit  $p$  ausdrücken, mit der ein Photon in Richtung des Raumwinkelsegmentes  $d\Omega' = \sin \theta' d\theta' d\phi'$  gestreut wird

$$p = 4\pi \int_{\phi}^{\phi+d\phi} \int_{\theta}^{\theta+d\theta} P_R(\cos \theta') \sin \theta' d\theta' d\phi'. \quad (3.11)$$

Da für unpolarisierte Strahlung die Photonen radialsymmetrisch um die ursprüngliche Ausbreitungsrichtung des Photons gestreut werden, können die Streuwinkel  $\theta_s$  und  $\phi_s$  unabhängig voneinander bestimmt werden. Dabei liegt  $\theta_s$  zwischen der ursprünglichen und der neuen Flugrichtung des Photons und  $\phi_s$  ist der Winkel zwischen der  $x'$ -Achse eines Systems, in dem das Photon vor der Streuung entlang der  $z'$ -Achse fliegt, und der Projektion der neuen Flugrichtung auf die  $x'$ - $y'$ -Ebene



**Abbildung 3.3:** Die Abbildung zeigt die Geometrie des Streuprozesses. Die Flugrichtung vor dem Streuprozess ist  $v_1$ , die nach dem Streuprozess  $v_2$ . Das ungestrichene System ist das feste System des Modells, das gestrichene ist immer so ausgerichtet, dass die  $z'$ -Achse entlang der Flugrichtung  $v_1$  zeigt, [eigene Abbildung].

dieses Systems. Die Geometrie der Streuwinkel ist in Abbildung 3.3 dargestellt. Aufgrund der Radialsymmetrie ist

$$\phi_s = 2\pi RN. \quad (3.12)$$

Der Winkel  $\theta_s$  wird durch den Zusammenhang

$$P_{cum}(\theta) := \frac{1}{2} \int_0^{\theta_s} P(\cos \theta') \sin \theta' d\theta' = RN \quad (3.13)$$

bestimmt [34]. Durch diese Gleichung wird die kumulative Phasenfunktion definiert. Sie gibt die Wahrscheinlichkeit an, mit der ein Photon innerhalb des Winkelintervalls  $[0, \theta_s]$  gestreut wird. Für die Rayleigh-Streuung kann die kumulative Phasenfunktion analytisch integriert werden

$$\frac{1}{2} \int_0^{\theta_s} \frac{3}{4} (1 + \cos^2 \theta') \sin \theta' d\theta' = \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{\cos \theta_s}{4} (3 + \cos^2 \theta_s) \right). \quad (3.14)$$

Somit sind die Streuwinkel  $\phi_s$  und  $\theta_s$  bekannt. Die Flugrichtung des Photons  $(a', b', c')$  nach dem Streuprozess im gestrichenen System ist

$$\begin{pmatrix} a' \\ b' \\ c' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \phi_s \sin \theta_s \\ \sin \phi_s \sin \theta_s \\ \cos \theta_s \end{pmatrix} \quad (3.15)$$

Die Flugrichtung im gestrichenen System wird durch eine drei-dimensionale Drehung in das Koordinatensystem des Modells überführt. Dabei wird zuerst die  $z'$ -Achse auf die  $z$ -Achse gedreht und anschließend die  $x'$ -Achse auf die  $x$ -Achse. Die

Drehmatrix ist folglich

$$M = \begin{pmatrix} \cos \phi & -\sin \phi & 0 \\ \sin \phi & \cos \phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \theta & 0 & \sin \theta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \theta & 0 & \cos \theta \end{pmatrix} \quad (3.16)$$

$$= \begin{pmatrix} -\cos \phi \cos \theta & -\sin \phi & \cos \phi \sin \theta \\ \sin \phi \cos \theta & \cos \phi & \sin \phi \sin \theta \\ -\sin \theta & 0 & \cos \theta \end{pmatrix} \quad (3.17)$$

Für  $\sin \theta \neq 0$  können die Drehwinkel  $\theta$  und  $\phi$  aus der Flugrichtung  $(a_i, b_i, c_i)$  vor dem Streuprozess bestimmt werden.

$$\theta = \arccos(c_i) \quad (3.18)$$

$$\phi = \begin{cases} \arccos(a_i / \sin(\theta)) & , b_i > 0 \\ 2\pi - \arccos(a_i / \sin(\theta)) & , b_i < 0 \end{cases} \quad (3.19)$$

Die neue Drehrichtung ist somit

$$\begin{pmatrix} a_{i+1} \\ b_{i+1} \\ c_{i+1} \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} a' \\ b' \\ c' \end{pmatrix} \quad (3.20)$$

Für  $\sin \theta \rightarrow 0$  (das Photon fliegt senkrecht nach oben oder nach unten) wird das Argument  $a / \sin(\theta)$  numerisch instabil. In diesem Fall kann  $\phi$  nicht bestimmt werden. Da das Photon jedoch schon entlang der  $z$ -Achse fliegt, kann die neue Flugrichtung des Photons im Modellsystem unter Beachtung der Orientierung der Flugrichtung auf der  $z$ -Achse gleich der im gestrichenen System gesetzt werden.

$$\begin{pmatrix} a_{i+1} \\ b_{i+1} \\ c_{i+1} \end{pmatrix} = \text{sgn}(c_i) \begin{pmatrix} a' \\ b' \\ c' \end{pmatrix}, \quad (3.21)$$

wobei  $\text{sgn}(c_i) = 1$  für  $c_i > 0$  und  $\text{sgn}(c_i) = -1$  für  $c_i < 0$  ist. Falls ein Streuprozess auf den Grenzflächen der Gitterboxen stattfindet und das Photon dadurch eine Boxgrenze überschreitet, werden bei den folgenden Rechenschritten der Streu- und Absorptionsindex der angrenzenden Box verwendet. Findet ein Streuprozess direkt auf der Modellgebietsgrenze statt, so werden gegebenenfalls die zyklischen Randbedingungen des Photonenfluges, siehe S. 23, berücksichtigt.

Nach einem Streuprozess wird ein neuer potentieller Weg bestimmt, und die Simulation des Photonenfluges beginnt wieder von vorne. Dies wird so lange fortgesetzt, bis das Photon durch den oberen Rand des Modellgebietes fliegt oder auf den Boden trifft und von ihm absorbiert wird.

### 3.1.4 Berechnung und Ausgabe des Ergebnisses

Prompt berechnet zuerst das Verhältnis von an einem Ort registrierten Photonen zu gestarteten Photonen. Im ersten Abschnitt wird die Berechnung der zur solaren spektralen Bestrahlungsstärke relativen spektralen Bestrahlungsstärke aus dem Photonenverhältnis beschrieben. Im zweiten Abschnitt wird aus der relativen spektralen Bestrahlungsstärke die Bestrahlungsstärke in absoluten Einheiten

$W/(m^2nm)$  berechnet. Der dritte Abschnitt beschreibt die Integration der spektralen Bestrahlungsstärke, die in Prompt auch mit einer Erythem-Wirkungsfunktion gewichtet werden kann. Im letzten Abschnitt wird die Steuerung der Ausgabe mithilfe der *control*-Datei erläutert.

### 3.1.4.1 Relative spektrale Bestrahlungsstärke

Die Anzahl der Photonen  $n(x_i, y_j, z_k)$ , die in der Höhe  $z = z_k$  durch die Fläche  $(x_i, x_i + dx) \cdot (y_j, y_j + dy)$  fliegen, wird während der Simulation des Photonenfluges bestimmt. Im Folgenden werden die Indizes, die die Diskretisierung der Position symbolisieren, weggelassen. Bei der Bildung der Summen wird die vertikale Richtung  $\uparrow$  oder  $\downarrow$  des Photons registriert, und ob das Photon auf seinem bisherigen Weg schon gestreut wurde und somit zum diffusen Teil der Strahlung *dif* gehört oder ob es direkt (=ohne Streuung) *dir* bis zum Ort der Registrierung geflogen ist. Wird diese Summe der Photonen an einem Ort durch die Anzahl der am oberen Rand der Atmosphäre (TOA) gestarteten Photonen  $n_\odot$  geteilt, so entspricht der Quotient dem Verhältnis der Bestrahlungsstärke an diesem Ort zur spektralen Bestrahlungsstärke am oberen Rand durch die Sonne, da jedes Photon einen Teil der transportierten Energie darstellt. Die solare spektrale Bestrahlungsstärke  $F_{\lambda,\odot}$  wird im Allgemeinen für eine senkrecht zur Ausbreitungsrichtung stehende Fläche angegeben. Daher ist die spektrale Bestrahlungsstärke am oberen Rand der Atmosphäre entsprechend dem Cosinus-Gesetz  $F_{\lambda,\downarrow}(z = TOA) = F_{\lambda,\odot} \cos \theta_\odot$ . Somit ist die Bedeutung des Quotienten der Photonenzahlen

$$\frac{n(x, y, z)}{n_\odot} = \frac{F_\lambda(x, y, z)}{F_{\lambda,\odot} \cos \theta_\odot} =: F_\lambda^*, \quad (3.22)$$

wobei die relative spektrale Bestrahlungsstärke  $F_\lambda^*$  durch diese Gleichung definiert wird. Prompt kann die relative spektrale Bestrahlungsstärke als drei-dimensionales Feld ausgeben, wobei der direkte  $F_{\lambda,dir}^*$ , der diffuse nach oben gerichtete  $F_{\lambda,dif,\uparrow}^*$  und der diffuse nach unten gerichtete Anteil  $F_{\lambda,dif,\downarrow}^*$  unterschieden werden.

$$\begin{aligned} F_{\lambda,dir}^*(x, y, z) &= \frac{F_{\lambda,dir}(x, y, z)}{F_{\lambda,\odot}} = \frac{n_{dir}(x, y, z)}{n_\odot} \\ F_{\lambda,dif,\uparrow}^*(x, y, z) &= \frac{F_{\lambda,dif,\uparrow}(x, y, z)}{F_{\lambda,\odot}} = \frac{n_{dif,\uparrow}(x, y, z)}{n_\odot} \\ F_{\lambda,dif,\downarrow}^*(x, y, z) &= \frac{F_{\lambda,dif,\downarrow}(x, y, z)}{F_{\lambda,\odot}} = \frac{n_{dif,\downarrow}(x, y, z)}{n_\odot}. \end{aligned} \quad (3.23)$$

Im Allgemeinen ist der Nutzer jedoch nur an Teilmengen des drei-dimensionalen Datensatzes oder an räumlichen Mitteln interessiert. Daher ist für folgende Ergebnisse in Prompt eine eigenes Ausgabeformat vorgesehen:

- die relative spektrale Bestrahlungsstärke am Boden. Sie wird auch als spektraler Transmissionsgrad  $T(\lambda)$  bezeichnet. Prompt gibt weiterhin den Anteil  $T_{dir}(\lambda)$  aus, der durch direkte Einstrahlung erzeugt wird.

$$\begin{aligned} T(\lambda)(x, y) &:= F_{\lambda,dir}^*(x, y, z = 0) + F_{\lambda,dif}^*(x, y, z = 0) \\ T_{dir}(\lambda)(x, y) &:= F_{\lambda,dir}^*(x, y, z = 0) \end{aligned} \quad (3.24)$$

- die relative spektrale Bestrahlungsstärke am oberen Rand der Atmosphäre, die im Folgenden als spektrale Reflektivität  $R(\lambda)$  der Atmosphäre bezeichnet wird.

$$R(\lambda)(x, y) := F_{\lambda,dir}^*(x, y, z = TOA) + F_{\lambda,dif}^*(x, y, z = TOA) \quad (3.25)$$

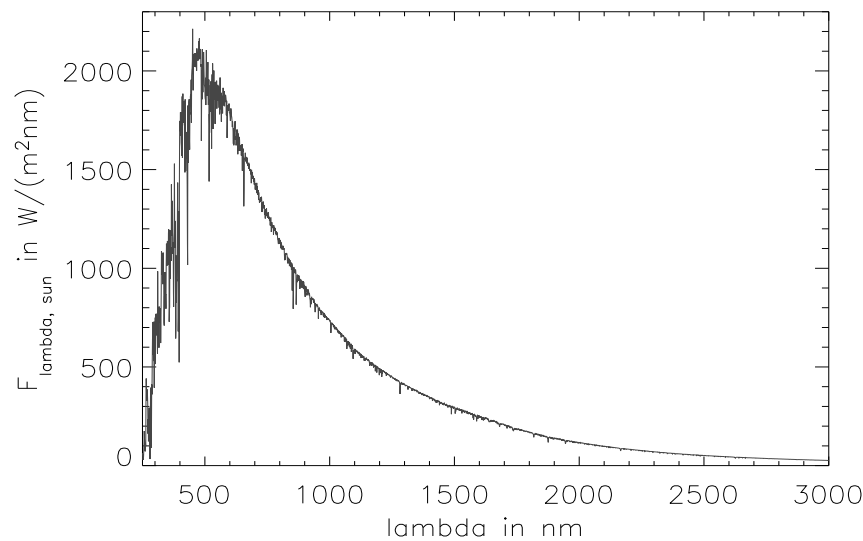
- die Profile der horizontal gemittelten, relativen, spektralen Bestrahlungsstärken  $\overline{F}_{\lambda,dir}^*(z)$ ,  $\overline{F}_{\lambda,dif,\uparrow}^*(z)$  und  $\overline{F}_{\lambda,dif,\downarrow}^*(z)$ .
- der entlang der  $y$ -Richtung gemittelte spektrale Transmissionsgrad  $T(\lambda)$  in Abhängigkeit von  $x$  und  $\lambda$ . Diese Ausgabe ist für Studien gedacht, bei denen sich das Modellgebiet nur in  $x$ -Richtung ändert. Der Vorteil dieser Ausgabe-Option ist eine kompaktere Darstellung des Ergebnisses in Abhängigkeit von der Wellenlänge.

### 3.1.4.2 Spektrale Bestrahlungsstärke

Mithilfe des solaren Spektrums können alle soeben beschriebenen relativen Größen nach Gleichung (3.22) in absolute umgewandelt werden.

$$F_\lambda = F_\lambda^* F_{\lambda,\odot} \cos \theta_\odot \quad (3.26)$$

Die absoluten Größen werden in  $mW/(m^2nm)$  ausgegeben. Für Promt werden hierfür die in dem Modell *libRadtran* vorhandenen solaren Spektren [28], [30] übernommen. Die von Kurutz [30] abgeleiteten Spektren, siehe Abbildung 3.4, geben die solare Bestrahlungsstärke für einen Wellenlängenbereich von 250 bis 10000 nm an und ermöglichen es somit, den gesamten solaren Strahlungstransfer zu simulieren.



**Abbildung 3.4:** Die Abbildung zeigt die solare spektrale Bestrahlungsstärke außerhalb der Erdatmosphäre nach Kurutz [30].

### 3.1.4.3 Integration der spektralen Bestrahlungsstärke

Prompt kann die spektrale Bestrahlungsstärke  $F_\lambda(\lambda)$  über das simulierte Wellenlängenintervall  $\lambda_{start} < \lambda < \lambda_{end}$  integrieren

$$F = \int_{\lambda_{start}}^{\lambda_{end}} F_\lambda(\lambda) d\lambda. \quad (3.27)$$

Nach der Definition müssten eigentlich über alle möglichen Wellenlängen von  $\lambda_{start} = 0$  bis  $\lambda_{end} \rightarrow \infty$  integriert werden. Im Fall der Modellierung muss das

simulierte Wellenlängenintervall jedoch begrenzt werden. Für biologische Untersuchungen kann es auch nützlich sein, die Einstrahlung nach der Empfindlichkeit eines Organismus gegenüber der Einstrahlung spektral zu gewichten. Für eine Anzahl von biologischen Effekten wird zu diesem Zweck eine Wirkungsfunktion  $W$  definiert. Wird die spektrale Bestrahlung  $F_\lambda$  mit der Wirkungsfunktion  $W$  gewichtet integriert, so wird die biologisch wirksame Bestrahlungsstärke  $F_{bio}$  errechnet [59]

$$F_{bio} = \int_{\lambda_{start}}^{\lambda_{end}} W(\lambda) F_\lambda(\lambda) d\lambda. \quad (3.28)$$

Prompt bietet die Möglichkeit, die spektrale Bestrahlungsstärke mit der CIE-Wirkungsfunktion (Commission International d'Eclairage) für Erythem (Hautrötung, -krebs)-wirksame Strahlung nach McKinlay und Diffey [42] gewichtet zu integrieren.

$$W_{CIE}(\lambda) = 10^{f_{CIE}(\lambda)}, \quad (3.29)$$

wobei  $f_{CIE}(\lambda)$  eine wellenlängenabhängige Formel ist

$$f_{CIE}(\lambda) = \begin{cases} 0 & , 286 \text{ nm} \leq \lambda < 298 \text{ nm} \\ -0.094(\lambda - 298) & , 298 \text{ nm} \leq \lambda < 328 \text{ nm} \\ -0.015(\lambda - 139) & , 328 \text{ nm} \leq \lambda \leq 400 \text{ nm}, \end{cases} \quad (3.30)$$

wobei  $\lambda$  in  $\text{nm}$  anzugeben ist.

#### 3.1.4.4 Steuerung der Ergebnisausgabe

Die Ausgabe der Ergebnisse kann in verschiedenen Formaten erfolgen und wird mit Einstellungen in der *control*-Datei, siehe Anhang B, gesteuert. Das horizontale Mittel des spektralen Transmissionsgrads  $T(\lambda)$  und der spektralen Reflektivität werden zusammen mit der durchschnittlichen Anzahl an Streuungen eines Photons für jeden Lauf automatisch ausgegeben. Die zwei-dimensionalen Felder des spektralen Transmissionsgrads  $T(\lambda)$  und der spektralen Reflektivität werden ausgegeben, wenn die Option `xy_output = .TRUE.` gesetzt wird. Die Ausgabe des drei-dimensionalen Datensatzes der Bestrahlungsstärke wird durch `xyz_output = .TRUE.`, die Ausgabe der Profile durch `z_output = .TRUE.` aktiviert. Für den Spezialfall, dass sich das Modellgebiet nur entlang der  $x$ -Achse ändert, wird die Möglichkeit eingerichtet, das Simulationsergebnis entlang der  $y$ -Achse zu mitteln und in Abhängigkeit von  $x$  und  $\lambda$  auszugeben. Dies wird bei der Einstellung `x_lambda_output = .TRUE.` ausgeführt.

Wird die Option `spectral_weighting = .TRUE.` gesetzt, so werden sämtliche Ergebnisse mit dem solaren Spektrum *ispec* gewichtet. Dabei muss das Spektrum so gewählt werden, dass es den gesamten von Prompt zu simulierenden Wellenlängenbereich abdeckt und seine spektrale Auflösung mit der der Prompt-Simulation übereinstimmt. Die meisten Spektren werden mit einer Auflösung von 1 nm angegeben. Durch die Option `integration = .TRUE.` wird die Ausgabe der über den simulierten Wellenlängenbereich integrierten Ergebnisse aktiviert. Mit der Option `only_integrated = .TRUE.` wird die Ausgabe der spektralen Größen unterdrückt und nur die integrierten Größen werden ausgegeben. Soll bei der Integration die CIE-Wirkungsfunktion berücksichtigt werden, so ist die Option `cie_weighting =`

*.TRUE.* zu setzen.

Prompt-Rayleigh ist jetzt ein vollständiges Modell, das vom Nutzer definierte Simulationsparameter einliest, den Strahlungstransfer für das entsprechende Szenario simuliert und anschließend die Ergebnisse ausgibt.

## 3.2 Simulation der Absorption

Das Programm wird im Folgenden so erweitert, dass die Absorption durch  $CO_2$ ,  $H_2O$ ,  $O_2$  und für einige Absorptionslinien von  $O_3$  bei der Simulation berücksichtigt werden kann. Im ersten Abschnitt wird die Berechnung der Absorptionkoeffizienten und im zweiten Abschnitt die Simulation der Absorption während des Photonenfluges beschrieben. Der dritten Abschnitt erläutert die Berechnung und die Ausgabeoptionen der neuen Simulationsergebnisse. **Das Programm erhält mit dieser Erweiterung den Namen Promt.**

### 3.2.1 Berechnung des Absorptionskoeffizienten

Die Darstellung großer Wellenlängenbereiche im Strahlungstransfer ist keine triviale Aufgabe, da der Absorptionsquerschnitt  $\sigma_{abs}$  auch im Subnanometerbereich stark variabel ist, und für den solaren Strahlungstransfer ein Wellenlängenbereich von einigen  $1000\text{ nm}$  simuliert werden muss. Daher ist es nicht ausreichend, die Absorption für einzelne Wellenlängen zu simulieren, wenn die spektrale Auflösung der Simulation in der Größenordnung von Nanometern ist. Promt löst dieses Problem, indem es das zu simulierende Spektrum in kleinere Intervalle aufteilt, für die jeweils eine eigene Strahlungstransfer-Simulation durchgeführt wird. Bei den einzelnen Simulationen werden über das Intervall gemittelte Absorptionskoeffizienten verwendet, die von zwei Routinen namens *lili* und *lilibroad* berechnet werden. Sie wurden 1998 bis 1999 von Scheirer [55] entwickelt. Sie werden vom Autor dieser Diplomarbeit leicht modifiziert in Promt eingebaut.

Im ersten Abschnitt dieses Kapitels werden die von Scheirer entwickelten Routinen, im zweiten Abschnitt der Einbau dieser Routinen in Promt beschrieben. Da die Absorption von Ozon im UV- und sichtbaren Wellenlängenbereich in den von Scheirer entwickelten Routinen nicht berücksichtigt wird, werden in Promt zusätzlich gemessene Absorptionsquerschnitte von Ozon verwendet. Diese Erweiterung wird im dritten Abschnitt beschrieben.

#### 3.2.1.1 Beschreibung der Routinen von Scheirer

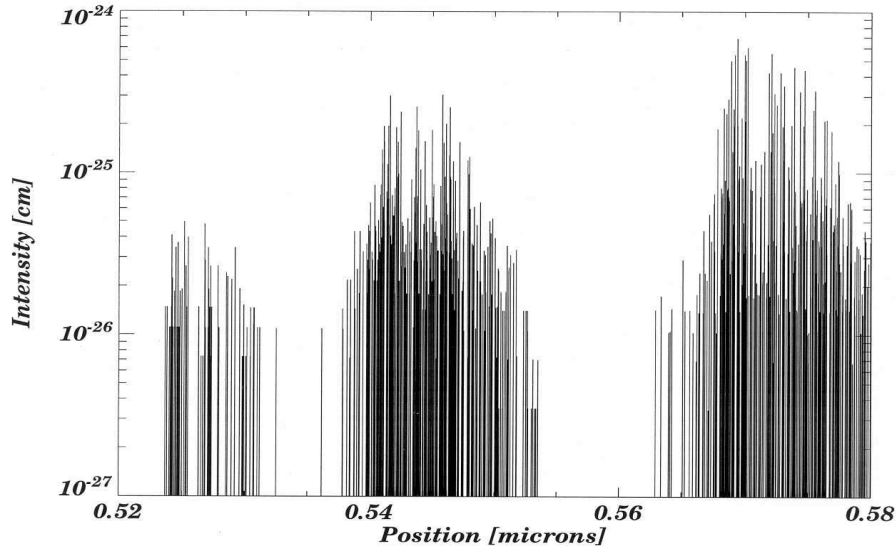
Scheirer entwickelte zwei Routinen namens *lili* und *lilibroad*, die die Absorptionsquerschnitte  $\sigma_{abs,j}$  für die Absorber  $j = CO_2$ ,  $H_2O$ ,  $O_2$  und teilweise für  $O_3$  in Abhängigkeit von Druck und Temperatur berechnen und diese anschließend über ein Wellenlängenintervall mitteln. Der entscheidende Unterschied zwischen den beiden Routinen liegt im Mittelungsverfahren.

Beide Routinen lesen zu Beginn der Rechnung die benötigten Informationen der Absorptionslinien - Linienstärke und Halbwertsbreite der Druckverbreiterung - aus der Datenbank HITRAN Version 1996 ein. In Abbildung 3.5 sind die Positionen und Stärken einiger der in HITRAN gespeicherten Absorptionslinien dargestellt. Da die HITRAN-Datenbank nur Absorptionslinien von Ozon für den infraroten



Wellenlängenbereich bereitstellt, wird die Absorption durch Ozon im sichtbaren und im UV-Bereich von lili und lilibroad bei Berechnung des Absorptionsquerschnitts nicht berücksichtigt.

Die Linien werden, wie in Abschnitt 2.4 beschrieben, verbreitert, und der Ab-



**Abbildung 3.5:** In der HITRAN-Datenbank sind unter anderem die Intensität und Position der Absorptionslinien von atmosphärischen Gasen gespeichert, [55].

sorptionskoeffizient für eine große Anzahl von Stützstellen in dem betrachteten Wellenlängenintervall bestimmt. Die Berechnung des über das Wellenlängenintervall gemittelten Absorptionskoeffizienten  $\overline{\sigma_{abs}}$  ist bei den Routinen lili und lilibroad unterschiedlich.

Die Routine lili berechnet diesen durch direkte Mittelung der Absorptionsquerschnitte. Die hierdurch ermittelten Absorptionskoeffizienten können jedoch nur für monochromatische oder extrem engbandige Simulationen verwendet werden. Für Wellenlängenintervalle im Bereich von Nanometern wird die Absorption durch dieses Verfahren jedoch überschätzt, was Scheirer [55] sinngemäß wie folgt erklärt:

Die Atmosphäre ist für eine Wellenlänge ab einem bestimmten Grenzwert des Absorptionskoeffizienten lichtundurchlässig. Wie weit der Absorptionskoeffizient über diesem Grenzwert liegt, hat keine Auswirkung auf die Einstrahlung am Erdboden, da die Strahlung dieser Wellenlängen ohnehin vollständig absorbiert wird. Wird jedoch der Absorptionsquerschnitt über lichtundurchlässige und -durchlässige Wellenlängenbereiche gemittelt, so hat die Größe des Absorptionskoeffizienten im undurchlässigen Bereich einen entscheidenden Einfluss auf den über die Wellenlänge gemittelten Absorptionsquerschnitt.

Daher entwickelte Scheirer die Routine lilibroad, die den gemittelten Absorptionskoeffizienten durch Mittelung des spektralen Transmissionsgrads  $T(\lambda) = e^{-k_{abs}(\lambda)s}$  berechnet. Für den mittleren optischen Weg  $s$  wird hierbei die Dicke der Schichten der Modellatmosphäre angenommen. Durch eine Approximation lassen sich die effektiv gemittelten Absorptionsquerschnitte der einzelnen Gase aus dem gemittelten Transmissionsgrad zurückgewinnen.

Scheirer sieht in beiden Routinen die Möglichkeit vor, die Absorption jedes Gases einzeln zu deaktivieren. Des weiteren kann die Form der Absorptionslinie bestimmt

werden, siehe Abschnitt 2.4. Die Linien können nach der Lorentz-Funktion oder der Voigt-Funktion verbreitert werden, oder es wird je nach Situation eine der beiden Funktionen verwendet. In Höhen, in denen sowohl die Doppler-Verbreiterung als auch die Druckverbreiterung wichtig sind, wird die Voigt-Funktion, in Regionen, in der die Druckverbreiterung dominiert, die schneller zu berechnende Lorentz-Funktion verwendet.

### 3.2.1.2 Implementierung in Promt

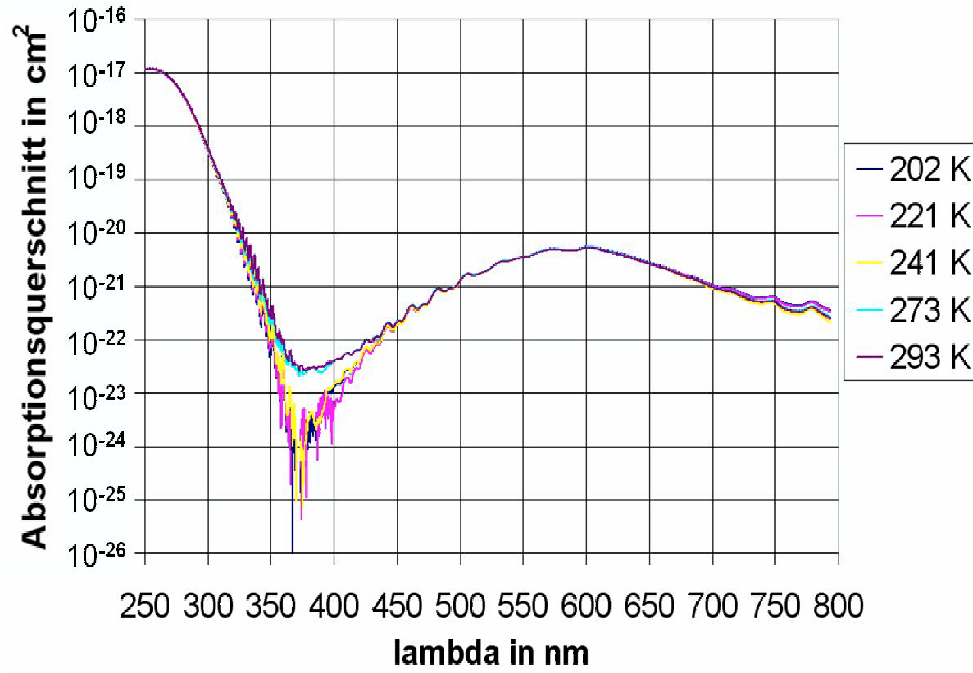
In Promt werden vom Autor dieser Diplomarbeit modifizierte Versionen der Routinen *lili* und *lilibroad* verwendet. Die Routinen verwenden in Promt die zur Berechnung der Absorptionsquerschnitte benötigten Druck- und Temperaturprofile sowie die Teilchendichte der absorbierenden Gase der in der *control*-Datei ausgewählten Modell-Atmosphäre (siehe S. 20). Weiterhin werden in Promt bereits berechnete Absorptionskoeffizienten in einem Dateisystem abgelegt, da die Berechnung der wellenlängengemittelten Absorptionsquerschnitte sehr rechenzeitaufwendig ist. Folgende Simulationen, die die gleichen Absorptionskoeffizienten verwenden, können dann erheblich schneller durchgeführt werden, da Promt in diesem Fall feststellt, dass die Absorptionskoeffizienten schon berechnet wurden. Es liest diese ein und berechnet den Absorptionskoeffizienten  $k_{abs}$  nach der Gleichung

$$k_{gas} = \sum_{j=1}^J n_j \overline{\sigma_{abs,j}} \quad (3.31)$$

Die Routinen von Scheirer geben zahlreiche Meldungen über den Status des Berechnungsprozesses in Dateien und auf dem Bildschirm aus. *Da die Routinen jedoch sehr häufig in Promt aufgerufen werden, werden die Ausgaben Standard gemäß unterdrückt und werden nur ausgegeben, falls die Option `abs_log_file` aktiviert wird. Auch die weiteren von Scheirer vorgesehenen Einstellungen werden nach der Modifikation durch die *control*-Datei von Promt angesprochen. Die Option `broad = 0` aktiviert die Routine *lili*, die nur für monochromatische oder extrem engbandige Simulationen genutzt werden sollte, die Option `broad = 1` aktiviert das allgemeinere Berechnungsverfahren der Routine *lilibroad*. Das Linienprofil wird mithilfe der Option `shape` bestimmt. Die kombinierte Verwendung von Lorentz- und Voigt-Profil mit `shape = 3` wird empfohlen.*

### 3.2.1.3 Erweiterung der Absorption durch Ozon

Da die Datenbank HITRAN 1996 keine Daten über Absorptionlinien von Ozon im UV- und sichtbaren Wellenlängenbereich enthält, werden diese in Promt gesondert berücksichtigt. Dazu wird ein Datensatz direkter Messungen des Absorptionsquerschnitts der Hartley-, Huggins- und Chappuis-Banden von Burrows et al.[6] verwendet. Burrows misst den Absorptionsquerschnitt mit einer spektralen Auflösung von etwa 0.2 bis 0.4 nm in einem Wellenlängenbereich von 250 nm bis 790 nm für verschiedene Temperaturen. Die Absorptionsquerschnitte, siehe Abbildung 3.6, werden unter anderem auch für die Berechnung von Referenzspektren für die Fernerkundungs-Algorithmen von GOME und SCIAMACHI verwendet. Zur Berechnung des wellenlängengemittelten Absorptionsquerschnitts von Ozon werden die gleichen Mittelungsverfahren wie in den Routinen von Scheirer verwendet.



**Abbildung 3.6:** Prompt verwendet die von Burrows et al. [6] in Abhängigkeit der Wellenlänge und der Temperatur vermessenen Ozon-Absorptionsquerschnitte der Hartley-, Huggins-, Chappuisbanden, [eigene Abbildung].

Er kann durch die Mittelung des Absorptionsquerschnitts oder durch Mittelung des spektralen Transmissionsgrads berechnet werden. Durch Multiplikation des so ermittelten Absorptionsquerschnitts mit der Teilchendichte von Ozon wird der Absorptionskoeffizient  $k_{O_3}$  ermittelt.

Der in der Simulation des Photonenfluges verwendete Absorptionskoeffizient ist die Summe des durch lili oder lilibroad errechneten Absorptionskoeffizienten  $k_{gas}$  und dem separat berechneten Ozonabsorptionsquerschnitt  $k_{O_3}$ .

$$k_{abs} = k_{gas} + k_{O_3} \quad (3.32)$$

### 3.2.2 Gewicht der Photonen

Flugstrecken, -richtungen und Streuprozesse werden weiterhin wie in der Version Prompt-Rayleigh simuliert, siehe Abschnitt 3.1.3. Zusätzlich wird dem Photon jetzt aber auch ein Gewicht  $w$  zugeordnet, das den Energiegehalt des Photons beschreibt. Zu Beginn der Simulation ist das Gewicht des Photons  $w = 1$ . Fliegt das Photon durch ein absorbierendes Volumen, wird das Gewicht  $w$  des Photons nach dem Lambert'schen Gesetz verringert [38]

$$w(s_2) = w(s_1) \exp\left(-\int_{s_1}^{s_2} k_{abs}(s') ds'\right) \approx w(s_1) \exp\left(-\sum_{i=1}^n k_{abs,i} s_i\right), \quad (3.33)$$

wobei das Photon vom Ort  $s_1$  zum Ort  $s_2$  durch das absorbierende Medium fliegt. Die Näherung auf der rechten Seite der Gleichung ist möglich, wenn das durchflogene Medium entlang der Flugstrecke in  $n$  homogene Boxen unterteilt werden kann. Das Gewicht des Photons wird also kontinuierlich, und nicht wie ein reales

Photon als Ganzes absorbiert.<sup>4</sup>

In der Version Promt-Rayleigh endet die Simulation, wenn das Photon auf den Boden trifft oder ins Weltall entweicht. *Jetzt kann die Simulation auch enden, wenn das Gewicht des Photons einen Schwellwert  $e_{phot\_min}$  unterschreitet, der in der control-Datei festgelegt wird.* Das Photon gilt dann als vollständig absorbiert. Es wird dabei eine Simulationsunsicherheit in der Größenordnung des Schwellwertes  $e_{phot\_min}$  erzeugt. Der Benutzer muss bei der Festlegung von  $e_{phot\_min}$  Simulationsgenauigkeit gegen Rechenzeit abwägen, da für sehr kleine Werte von  $e_{phot\_min}$  die Simulation des Photonenfluges für Photonen mit kleinem Gewicht lange fortgesetzt wird. In bisherigen Simulationen hat sich der Wert  $e_{phot\_min} = 10^{-6}$  bewährt.

### 3.2.3 Erweiterung der Ausgabe

Mit der Berücksichtigung der Absorption treten Summen der Photonengewichte an die Stelle der Photonenanzahlen, siehe Abschnitt 3.1.4.1. Abgesehen davon bleibt die Berechnung der relativen spektralen Bestrahlungsstärke und aller von ihr abgeleiteten Größen unverändert. Zusätzlich werden ein paar neue Ergebnisse produziert. Dazu werden die in einem Volumen  $(x_i, x_i + dx) \cdot (y_j, y_j + dy) \cdot (zz_k, zz_{k+1})$  absorbierten Photonengewichte aufsummiert. Da die Absorption – im Gegensatz zur Bestrahlungsstärke – nicht pro Fläche, sondern pro Volumen bestimmt wird, muss die Summe der absorbierten Photonengewichte auch mit der Schichtdicke  $(zz_{k+1} - zz_k)$  normiert werden.

Es werden folgende Ergebnisse den in Abschnitt 3.1.4 beschriebenen hinzugefügt:

- bei der drei-dimensionalen Ausgabe die absorbierte Bestrahlungsstärke pro Höhenintervall  $dF_{abs}(x, y, z)/dz$ . Die Einheit der relativen Ausgabe ist  $1/km$  und der absoluten Ausgabe  $W/(m^2 nm km)$ ,
- bei der zwei-dimensionalen Ausgabe die in einer Säule absorbierte Bestrahlungsstärke, falls die Ausgabe gewichtet ist, bei der relativen Ausgabe einheitenlos, bei der absoluten mit der Einheit  $W/(m^2 nm)$ ,
- bei den Profilen das horizontale Mittel der absorbierten Bestrahlungsstärke pro Höhenintervall. Die Einheit der relativen Ausgabe ist  $1/km$  und der absoluten Ausgabe  $W/(m^2 nm km)$ ,
- bei der automatischen Ausgabe das horizontale Mittel der in einer Säule absorbierten Bestrahlungsstärke.

*Die ein-, zwei- oder drei-dimensionale Ergebnisausgabe der Absorption wird mit den gleichen Parametern der control-Datei gesteuert wie die Ausgabe von Promt-Rayleigh, siehe Abschnitt 3.1.4.*

## 3.3 Simulation der Wolken

Dieser Abschnitt beschreibt die Erweiterung von Promt, die es ermöglicht, Wolkenfelder beim Strahlungstransfer zu berücksichtigen. Zuerst muss das Wolkenfeld eingelesen und die Tropfendichte bestimmt werden. Im ersten Abschnitt wird die

---

<sup>4</sup>Daher entspricht das Verhalten von Photonen der Monte-Carlo-Simulation eher dem von Photonengruppen, von der ein Teil der Photonen absorbiert wird.

Eingabe von Wolkenfeldern in Prompt beschrieben. Im zweiten Abschnitt werden die zur Berechnung der optischen Eigenschaften der Wolkentropfen verwendeten Programme und deren Einbau in Prompt beschrieben. Der letzte Abschnitt erläutert die zur Berücksichtigung der Wolken notwendigen Änderungen der Simulation des Photonenfluges.

### 3.3.1 Wolkenfelder

In Prompt können verschiedene Wolkenfelder berücksichtigt werden. Neben einigen vereinfachten Wolkenformen ist es auch möglich, den Strahlungstransfer für dreidimensionale inhomogene Wolkenfelder zu simulieren, die durch das parallelisierte LES Modell PALM erzeugt werden.

PALM simuliert die thermische Konvektion in einer flachen Grenzschicht. Es löst die drei-dimensionale zeitlich gemittelte Boussinesq-approximierte Navier-Stokes-Gleichung sowie prognostische Gleichungen für Temperatur und die mittlere turbulente Energie. Die gesamte Wassergehalt, Wasserdampf und Flüssigwasser zusammen, wird in PALM mit der Strömung transportiert. Die Gesamtwassergehalt ist eine konservative Größe solange kein Niederschlag fällt. Die Kondensation wird nach den parametrisierten Kessler-Schema simuliert. Zur Strahlungstransfersimulation ist es erforderlich, neben dem Flüssigwassergehalt entweder Tröpfchenanzahl oder Tröpfchenradius zu kennen. Da PALM keine Aussagen diesbezüglich macht, müssen diese Informationen vom Nutzer vorgegeben werden. PALM wird unter anderem für Untersuchungen zur Wolkenbildung und deren Konvektionsmustern verwendet [56]. Da PALM Simulationen mit Gitterweiten im Bereich von 10 bis 100 m durchführen kann, sind die durch PALM erzeugten Wolkenfelder sehr detailliert.

PALM ist parallelisiert und für den Einsatz auf verschiedenen Großrechnern optimiert. Raasch und Schröter ermittelten 2001 die Skalierung von PALM [50]. Eine ausführliche Beschreibung von PALM, inklusive Anleitung zu Modellinstallation, ist im Internet unter [http://www.muk.uni-hannover.de/~raasch/PALM\\_group/PALM\\_group.html](http://www.muk.uni-hannover.de/~raasch/PALM_group/PALM_group.html) verfügbar.

*Das zu simulierende Wolkenfeld wird durch Einstellungen in der control-Datei ausgewählt:*

*Mit der Einstellung `cloud_type = 1` wird der Strahlungstransfer für eine horizontal homogene Wolkenschicht berechnet, deren Flüssigwassergehalt und effektiver Tropfenradius aus der Datei `cloudfile_1D` eingelesen werden. Die Höhenskala des Wolkenfeldes in `cloudfile_1D` muss mit der Höhenskala der verwendeten Modellatmosphäre identisch sein.*

*Mit der Einstellung `cloud_type = 2` wird die horizontal homogene Wolkenschicht, die wiederum durch die Datei `cloudfile_1D` spezifiziert wird, auf eine Hälfte des Modellgebietes begrenzt, die andere wird als wolkenlos angenommen. Wird bei `cloud_type = 1` oder `cloud_type = 2` die Einstellung `even_cloud = .TRUE.` gewählt, so wird für das gesamte Wolkenvolumen ein konstanter Tropfenradius, der durch `r_even` festgelegt ist, angenommen, und die Angaben in der Datei `cloudfile_1D` ignoriert.*

*Mit der Einstellung `cloud_type = 3` wird der Strahlungstransfer durch ein von PALM berechnetes Wolkenfeld simuliert, das in der Datei `cloudfile_LES` abgelegt ist. Für dieses Wolkenfeld ist nur die Einstellung `even_cloud = .TRUE.`*

möglich, wobei der Tropfenradius durch  $r\_even$  festgelegt wird. Für das PALM-Wolkenfeld müssen weiterhin die Gitterpunktanzahl der LES-Simulation  $nx\_LES$ ,  $ny\_LES$ ,  $nz\_LES$  und die Gitterpunktabstände  $dx\_LES$ ,  $dy\_LES$ ,  $dz\_LES$  angegeben werden. Die Gitterpunktabstände in horizontaler Richtung müssen für LES-Simulation und Monte-Carlo-Simulation übereinstimmen. Die Gitterpunktanzahl der Monte-Carlo-Simulation kann kleiner oder gleich groß wie die der LES-Simulation sein. Ist sie kleiner, so wird nur ein Ausschnitt des LES-Wolkenfeldes bei der Strahlungstransfer-Simulation berücksichtigt. Der Ausschnitt des verwendeten Wolkenfeldes wird ab den Gitterpunkten  $nx\_offset + 1$  und  $ny\_offset + 1$  eingelesen. In diesem Fall ist jedoch zu beachten, dass der Ausschnitt des Wolkenfeldes keine zyklischen Randbedingungen mehr aufweist. In diesem Fall müssen die Randbedingungen des Photonenfluges als reflektierend gewählt werden, da sich sonst bei zyklischen Randbedingungen des Photonenfluges die Unstetigkeit des Wolkenfeldes am Gebietsrand unrealistische Art und Weise auf den Strahlungstransfer auswirkt. Da PALM in der Grenzschicht (bis ca. 3 km) eine höhere vertikale Auflösung benutzt als Promt, wird das vertikale Koordinatensystem von Promt, siehe Abschnitt 3.1.2, für die Darstellung der unteren Atmosphärenschichten an die Auflösung von PALM angepasst. Die Eigenschaften der zusätzlich eingefügten Schichten werden durch lineare Interpolation der angrenzenden Schichten der Hintergrundatmosphäre ermittelt.

PALM errechnet den Flüssigwassergehalt  $LWC$  jeder Gitterzelle, der als Masse Flüssigwasser  $m_w$  pro Masse trockener Luft  $m_{air}$  angegeben wird. Aus dem  $LWC$  wird die Dichte des Flüssigwassers  $\rho_c$  errechnet.

$$\rho_c = \frac{m_w}{m_{air}} \rho_{air}(z), \quad (3.34)$$

wobei  $\rho_{air}$  die Dichte der Luft ist. Aus der Dichte des Flüssigwassers  $\rho_c$  in  $kg/m^3$  wird die Tröpfchendichte  $n_c$  berechnet.

$$n_c = \frac{LWC}{\frac{4}{3}\pi r_0^3}, \quad (3.35)$$

wobei  $r_0$  der Tröpfchenradius in der betrachteten Gitterzelle ist. Für  $cloud\_type = 1$  und  $cloud\_type = 2$  wird bereits  $\rho_c$  in der Datei angegeben und es muss nur noch Gleichung (3.35) angewandt werden.<sup>5</sup> Für niedrige Kumulusbewölkung liegt der Tröpfchenradius typischerweise im Bereich von ein bis zehn Mikrometern. In den im Ergebniskapitel beschriebenen Simulationen wird einen Tröpfchenradius von  $10 \mu m$  verwendet.

### 3.3.2 Berechnung der optischen Eigenschaften von Wolken

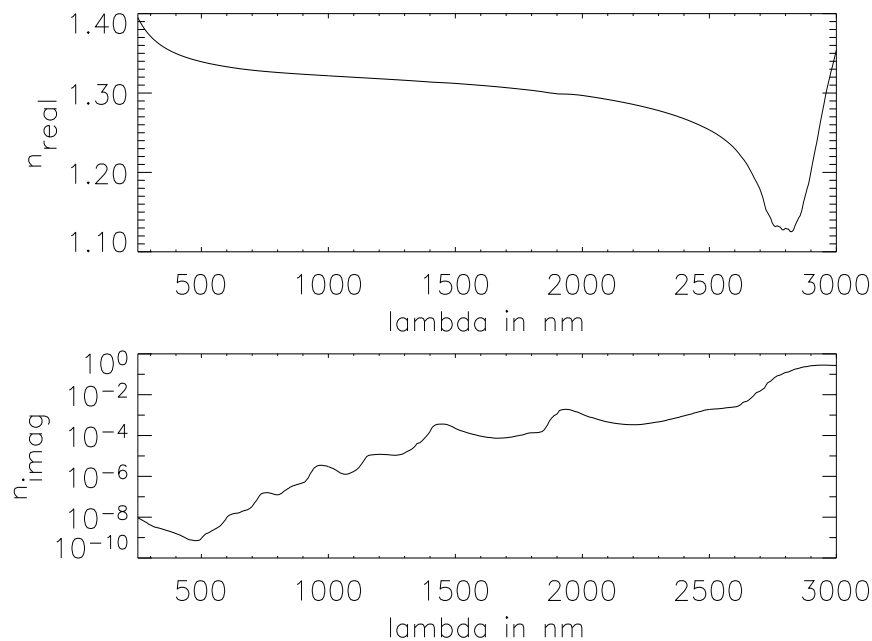
Im nächsten Schritt werden die optischen Eigenschaften der Tropfen mithilfe der in Abschnitt 2.3 beschriebenen Mie-Theorie bestimmt. Hierzu werden der Größenparameter  $x = 2\pi r_0/\lambda$  sowie der komplexe Brechungsindex von Wasser als Eingabeparameter benötigt. Der Tropfenradius  $r_0$  und die Wellenlänge  $\lambda$  werden durch

<sup>5</sup>Vorsicht! Im Programmcode wird der Variablenname  $LWC$  sowohl für den Flüssigwassergehalt als auch für  $\rho_c$  verwendet.

die Eingaben in der *control*-Datei bestimmt. Im ersten Abschnitt wird das Programm REFWAT1.f, das in Promt zur Bestimmung des komplexen Brechungsindex von Wasser verwendet wird, und seine Implementierung in Promt beschrieben, im zweiten Abschnitt das Programm MIEV0.f, das die Berechnung der optischen Eigenschaften der Wolkentropfen nach der Mie-Theorie durchführt, und dessen Implementierung in Promt.

### 3.3.2.1 Komplexer Brechungsindex von Wasser

Die Routine REFWAT1.f der *atmosphere and oceanic optical library REFLIB* berechnet den komplexen Brechungsindex von reinem Wasser für Wellenlängen von 10 nm bis 10 m. Die Routine wurde von W. Wiscombe and P. J. Flatau programmiert und basiert auf Messungen von Pope und Fry [48], Segelstein [61] und Ray [51]. Die Abhängigkeit des Brechungsindex von der Temperatur wird in REFWAT1.f für Wellenlängen größer als  $10\ \mu\text{m}$  berücksichtigt. Abbildung 3.7 zeigt den von REFWAT1.f berechneten realen und imaginären Teil des Brechungsindex von Wasser. Für den Einbau in Promt wird die Syntax von REFWAT1.f von dem



**Abbildung 3.7:** Im oberen Diagramm ist der Realteil des Brechungsindex dargestellt. Das untere Diagramm zeigt den Imaginärteil, welcher im simulierten Wellenlängenbereich um mehrere Größenordnungen schwankt. Der komplexe Brechungsindex ist eine Eingabegröße für die Mie-Berechnung. Der Brechungsindex wird in Promt mithilfe des Programms REFWAT.f [52] berechnet, [eigene Abbildung].

Autor dieser Diplomarbeit auf den Standard von FORTRAN 90 aktualisiert. Mit dem komplexen Brechungsindex, der Wellenlänge und dem Tröpfchenradius sind zur Mie-Berechnung benötigten Variablen vollständig bekannt.

### 3.3.2.2 Mie-Rechnung

In Promt wird das von Wiscombe [70], [71] entwickelte Programm MIEV0.f verwendet, das mithilfe der Mie-Theorie die Extinktionseffizienz  $Q_e$  und die Einfachstreu-Albedo  $\omega$  von sphärischen Partikeln berechnet

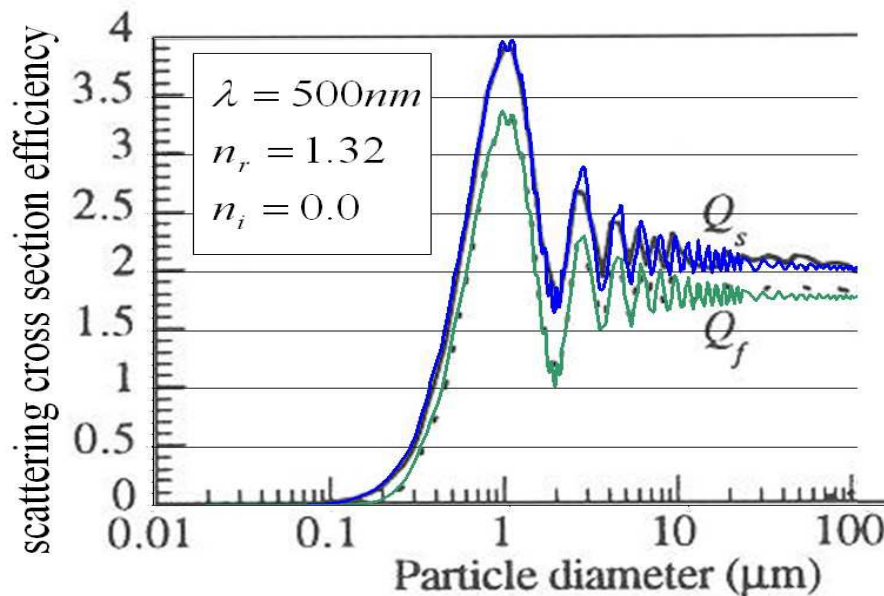
$$\omega = Q_s/Q_e, \quad (3.36)$$

wobei  $Q_s$  die Streueffizienz ist. Die hauptsächliche Schwierigkeit hierbei ist die Berechnung der in den Koeffizienten  $a_n$  und  $b_n$  vorkommenden Funktionen  $\psi_n$  und  $\xi_n$ , siehe Gleichung (2.47). Das Programm MIEV0.f bestimmt die Funktionswerte von  $\psi_n$  und  $\xi_n$  mithilfe von Aufwärts- und Abwärts-Rekursion nach  $n$ .

Die im Folgenden beschriebene Implementierung des Programms MIEV0.f in Promt wird von dem Autor dieser Diplomarbeit durchgeführt. Der Programmcode von MIEV0.f wird der Veröffentlichung von Wiscombe [71] entnommen und die Syntax des Codes auf den Standard von FORTRAN 90 aktualisiert. Im Code von Wiscombe werden die Größen  $S_1$  und  $S_2$  berechnet, siehe Gleichung (2.51). Der Programmcode wird so erweitert, dass das Programm auch die Phasenfunktion nach Gleichung (2.58) berechnet. Promt verwendet Extinktionseffizienz und Phasenfunktion des modifizierten MIEV0.f-Programms, die zur Verifikation mit Literaturangaben verglichen werden. Abbildung 3.8 zeigt die von Promt berechnete Streueffizienz  $Q_s$  und die Vorwärts-Streueffizienz  $Q_f$

$$Q_f(\lambda) = g(\lambda)Q_s(\lambda), \quad (3.37)$$

wobei der Asymmetriefaktor  $g$  das erste Moment der Phasenfunktion ist [34], im Vergleich zu einem Diagramm aus Jacobson [18]. Der Verlauf beider Größen ist,



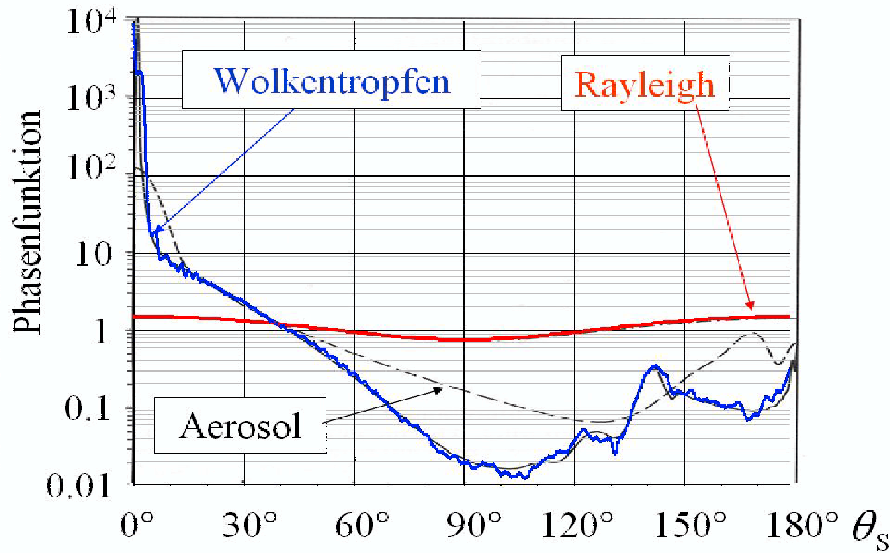
**Abbildung 3.8:** Die Abbildung zeigt die in Promt verwendete Extinktionseffizienz in blau und die Vorwärtsstreueffizienz in grün. Zum Vergleich werden die in Promt verwendeten Werte mit einem Diagramm aus Jacobson [18] unterlegt, die die gleichen Größen in schwarz durchgezogen und schwarz gepunktet zeigen, [eigene Abbildung].

sofern aus der Abbildung erkennbar, sehr ähnlich. Die geringfügigen Unterschiede



sind wahrscheinlich darauf zurückzuführen, dass die Berechnung von Prompt mit einer höheren Auflösung der Tropfengröße durchgeführt wird als in Jacobson. Ein quantitativer Vergleich konnte nicht durchgeführt werden, da das Diagramm aus Jacobson nur als Bild und nicht als Datenreihe vorliegt.

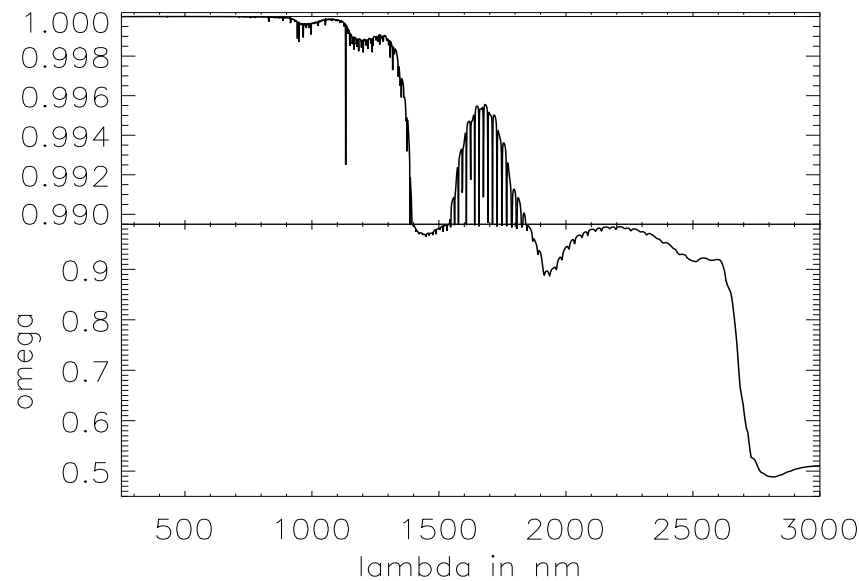
In Abbildung 3.9 wird die Phasenfunktion von Prompt mit einem Diagramm aus Liou [34] verglichen. Der Verlauf der von Prompt berechneten Rayleigh-Phasen-



**Abbildung 3.9:** Die Abbildung zeigt in blau eine von Prompt berechnete Phasenfunktion für ein Wolkentöpfchen mit dem Radius  $r_0 = 10 \mu\text{m}$  und die Wellenlänge  $\lambda = 500 \text{ nm}$ . Die rote Kurve zeigt die Phasenfunktion der Rayleigh-Streuung. Das Diagramm ist unterlegt mit einer Abbildung aus Liou [34], in der die gleichen Größen aufgetragen sind. Die Phasenfunktion des Aerosolpartikels kann nicht reproduziert werden, da der in [34] verwendete Brechungsindex nicht angegeben ist, [eigene Abbildung].

funktion ist, sofern aus Abbildung 3.9 erkennbar, identisch mit dem Diagramm aus Liou. Die Phasenfunktionen des Wolkentropfens sind geringfügig unterschiedlich. Insbesondere ist bei der von Prompt eine Feinstruktur zu erkennen, die auf der Abbildung von Liou nicht zu sehen ist. Die in Prompt verwendete Phasenfunktion ist für die Verwendung in einem Monte-Carlo-Modell von ausreichender Genauigkeit, da die häufig anstelle der Mie-Phasenfunktion verwendete Henyey-Greenstein-Funktion [21] wesentlich stärker von der wahren Phasenfunktion abweicht als die von Prompt berechnete Phasenfunktion. Ein quantitativer Vergleich konnte nicht durchgeführt werden, da das Diagramm aus Liou nur als Bild und nicht als Datenreihe vorliegt.

Die Berechnung der Einfachstreu-Albedo der für Prompt modifizierten Version von MIEV0.f kann aufgrund eines unbekannten Fehlers im Programmcode nicht verwendet werden. Stattdessen liest Prompt die Einfachstreu-Albedo  $\omega$  aus einer Datei ein, die durch das Programm mie.c erzeugt wird. mie.c ist in der Programmsammlung *libRadtran* (siehe S. 46) enthalten. Abbildung 3.10 zeigt die Einfachstreu-Albedo in Abhängigkeit der Wellenlänge. Für  $\lambda < 950 \text{ nm}$  ist sie größer als 0.999. Im Infraroten ist Wasser hingegen absorbierend. Für  $\lambda < 1390 \text{ nm}$  ist  $\omega > 0.99$ , jedoch hat diese geringe Abnahme der Einfachstreu-Albedo schon große Auswirkung auf den spektralen Transmissionsgrad  $T(\lambda)$  der Wolke, siehe Abbildung 4.8.



**Abbildung 3.10:** Das Diagramm zeigt die Einfachstreu-Albedo  $\omega$  in Abhängigkeit von der Wellenlänge. Sie wird durch das Programm `mie.c` berechnet, das in der Programmsammlung *libRadtran* (siehe S. 46) enthalten ist. Man beachte den geteilten Maßstab der Ordinate, [eigene Abbildung].

### 3.3.3 Berücksichtigung der Wolken beim Photonenflug

Die Simulation des Photonenflugs wird nach dem in den Abschnitten 3.1.3.2, 3.1.3.4 und 3.2.2 beschriebenen Schema durchgeführt, jedoch müssen Streu- und Absorptionskoeffizienten sowie die Phasenfunktion in Feldern, in denen sich Wolken befinden, angepasst werden. Streu- und Absorptionskoeffizient der Wolke,  $\beta_c$  und  $k_c$ , werden mithilfe der Tropfendichte  $n_c$ , der Extinktionseffizienz  $Q_e$  und der Einfach-Streualbedo  $\omega$  berechnet

$$\beta_c = r_0^2 Q_s n_c = \sigma_{sca,c} n_c \quad (3.38)$$

$$k_c = r_0^2 (1 - \omega) Q_e n_c = r_0^2 Q_{abs} n_c, \quad (3.39)$$

wobei  $r_0$  der Tropfenradius ist.

Anschließend werden die optischen Eigenschaften von Boxen, die Wolken enthalten, angepasst. Die Streukoeffizienten der Rayleigh- und Mie-Streuung werden addiert.

$$\beta(x, y, z) = \beta_R(z) + \beta_c(x, y, z) \quad (3.40)$$

Auch der Absorptionskoeffizient der Wolken  $k_c$  und der der Absorption durch Gase  $k_{gas} + k_{O3}$ , siehe Abschnitt 3.2.1, werden addiert

$$k_{abs}(x, y, z) = k_{gas}(z) + k_{O3}(z) + k_c(x, y, z). \quad (3.41)$$

Die Argumente der Größen in den letzten beiden Gleichungen geben jeweils an, ob sie in Promt als horizontal homogene Größe oder als drei-dimensionales Feld berechnet werden. Die Phasenfunktionen der Rayleigh-Streuung  $P_R(\cos \theta_s)$  und die der Mie-Streuung an den Wolkentröpfchen  $P_c(\cos \theta_s)$  werden nach den Streukoeffizienten gewichtet gemittelt [55]

$$P(\cos \theta_s) = \frac{\beta_R P_R(\cos \theta_s) + \beta_c P_c(\cos \theta_s)}{\beta_R + \beta_c}. \quad (3.42)$$

Wie bei der in Abschnitt 3.1.3.4 beschriebenen Rayleigh-Streuung wird auch zur Simulation des Streuprozesses an Wolkentropfen die kumulative Phasenfunktion aus der Phasenfunktion nach Gleichung (3.13) berechnet. Die Integration kann im Gegensatz zur Rayleigh-Phasenfunktion nicht analytisch durchgeführt werden. In Prompt wird sie mithilfe des zentrierten Euler-Verfahrens realisiert.

## 3.4 Reflektion am Boden

Die letzte Erweiterung von Prompt ist die Berücksichtigung eines reflektierenden Untergrundes. *Es stehen mehrere Optionen in der control-Datei zur Verfügung, um das Reflektionsverhalten des Untergrundes festzulegen:*

*Mit der Einstellung `albedo_type = 1` wird eine Simulation für einen horizontal homogenen Untergrund mit der Albedo `albedo` und mit dem Reflektionsverhalten `ground_type` durchgeführt.*

*Mit der Einstellung `albedo_type = 2` wird das Simulationsgebiet in zwei Hälften aufgeteilt. Für  $x < 0$  hat der Untergrund die Albedo `albedo` und das Reflektionsverhalten `ground_type`, für  $x > 0$  werden die Albedo `albedo2` und das Reflektionsverhalten `ground_type2` verwendet.*

*Mit der Einstellung `albedo_type = 3` wird die Albedo und das Reflektionsverhalten aus den Dateien `albedo_file` und `ground_file` eingelesen. Die Albedo muss zwischen 0 und 1 liegen, beim Reflektionsverhalten kann bislang zwischen Lambert'sche Streuung `ground_type = 1` und spiegelnder Reflektion `ground_type = 2` gewählt werden.*

### 3.4.1 Berücksichtigung des Untergrundes beim Photonenflug

In der bisherigen Version von Prompt wird die Simulation des Fluges eines Photons abgebrochen, sobald es auf den Boden trifft, und das Photon wird als vollständig absorbiert registriert. Bei reflektierendem Untergrund wird beim Auftreffen des Photons das Gewicht  $w$  des Photons entsprechend der Albedo  $A$  des Untergrundes reduziert

$$w_{i+1} = A w_i. \quad (3.43)$$

Falls das Photonengewicht hierdurch den Schwellwert `e_phot_min` unterschreitet, wird das Photon als vollständig vom Boden absorbiert gewertet, siehe Abschnitt 3.2.2. Im Allgemeinen ist dies nicht der Fall, und es wird die neue Flugrichtung des Photons in Abhängigkeit vom Reflektionsverhalten des Untergrundes bestimmt. In Prompt kann zwischen zwei Reflektionsarten gewählt werden: Spiegelnde Reflektion und Lambert'sche Streuung. Die spiegelnde Reflektion ist eine Vereinfachung des Reflektionsverhaltens von Photonen an einer glatten Wasseroberfläche. Die vertikale Komponente der Ausbreitungsrichtung wird nach oben gespiegelt  $c_{i+1} = \text{abs}(c_i)$ , die Flugrichtung in  $x$ - und  $y$ -Richtung ändert sich nicht. Die Lambert'sche Streuung ist eine Näherung für das Reflektionsverhalten des Erdbodens, bei der jede Ausbreitungsrichtung in den freien Halbraum über dem Boden gleich wahrscheinlich ist. Die Richtung des Photons nach der Streuung berechnet sich nach [64]

$$\theta_{i+1} = \sqrt{RN} \quad (3.44)$$

$$\varphi_{i+1} = 2\pi RN, \quad (3.45)$$

wobei  $RN$  eine Zufallszahl ist.

Für die spätere Auswertung summiert Promt die Photonengewichte *vor* der Reflexion. Daher wird die Bestrahlungsstärke des Untergrundes berechnet. Wird diese mit  $1 - A$  multipliziert, so kann die vom Untergrund absorbierte Leistung berechnet werden.

### 3.5 Programmstruktur

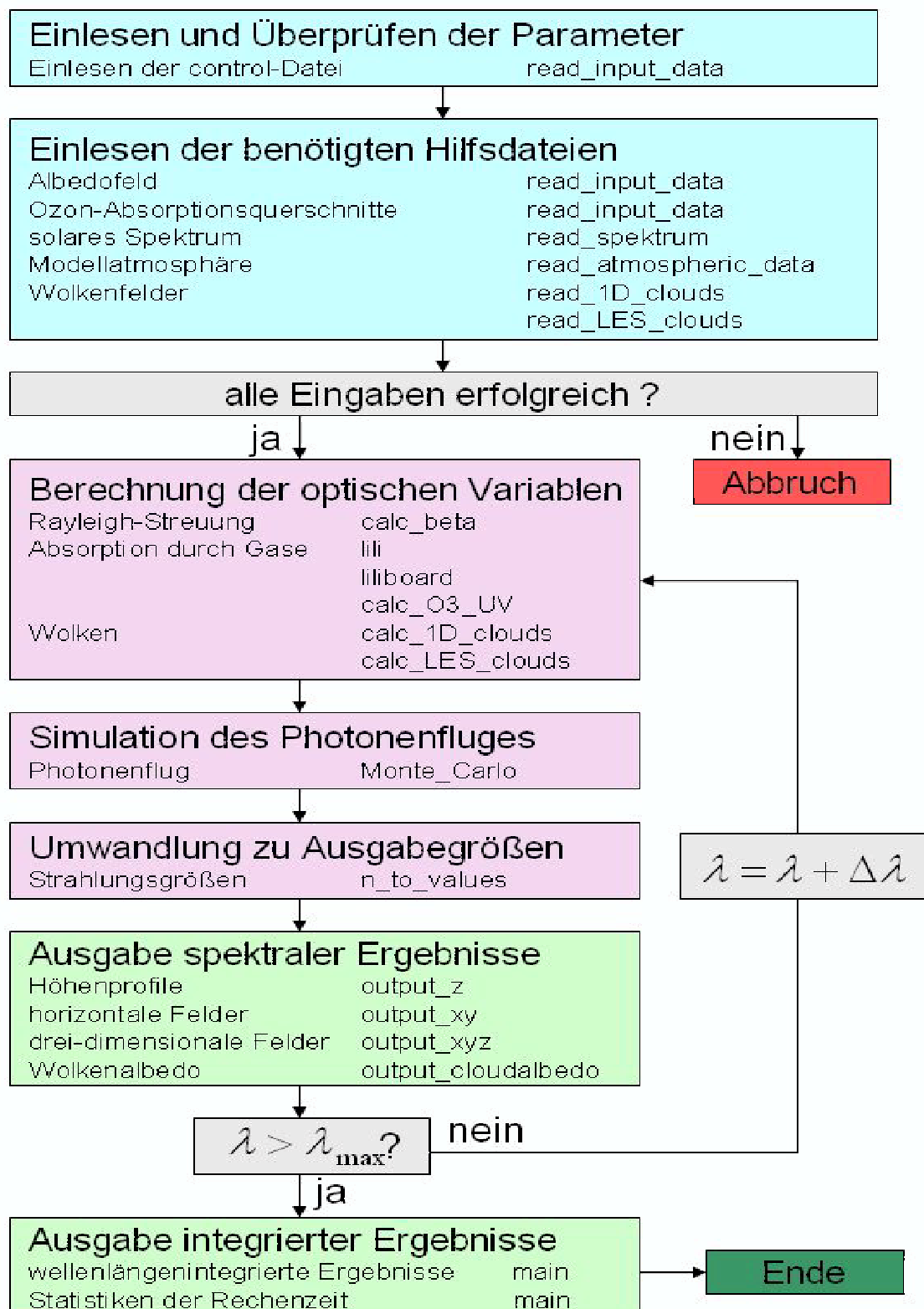
In diesem Kapitel wird ein Überblick gegeben, in welcher Reihenfolge Promt nach Abschluss der bisher beschriebenen Entwicklung die zur Simulation notwendigen Rechenschritte durchführt. Abbildung 3.11 zeigt die im Folgenden beschriebene Struktur von Promt im Überblick. Zu Beginn eines Modelllaufs werden alle benötigten Steuerungsparameter aus der *control*-Datei eingelesen, siehe auch Anhang B. Das Einlesen der Parameter erfolgt mithilfe von Namenslisten. In ihr werden alle in den vorangegangenen Kapiteln erläuterten Einstellungen für die Strahlungstransfer-Simulation festgelegt:

- Sonnenzenitwinkel und Stundenwinkel
- Anzahl der Gitterpunkte und Gitterpunktabstand
- Höhe der Modellatmosphäre
- horizontale Randbedingungen
- Albedo und Reflektionstyp des Untergrundes
- Anzahl der pro Wellenlänge und Gitterfläche simulierten Photonen
- kürzeste und längste zu simulierende Wellenlänge
- Größe der Wellenlängenintervalle
- Hintergrundatmosphäre
- extraterrestrisches Spektrum
- Absorption durch  $H_2O$ ,  $CO_2$ ,  $O_3$  und  $O_2$
- Verteilung des Flüssigwassergehaltes der Wolken
- effektive Tröpfchengröße der Wolken
- Ausgabe der Simulationsergebnisse in 1, 2 oder 3 Dimensionen

Beim Einlesen der Einstellungen wird deren Verträglichkeit untereinander von Promt überprüft. Wenn beispielsweise die Gewichtung mit der CIE-Wirkungsfunktion aktiviert wird, so wird der zu simulierende Wellenlängenbereich auf den Definitionsbereich dieser Funktion eingeschränkt. Oder falls eine Simulation mit einem LES-Wolkenfeld durchgeführt wird, überprüft Promt, ob die Gitterpunktabstände der Monte-Carlo-Simulation mit denen der LES-Simulation übereinstimmen. Falls Promt eine fehlerhafte Kombination von Eingabeparametern erkennt, wird entweder der Benutzer aufgefordert, eine seiner Einstellungen zu ändern, oder eine Änderung der Eingabe wird automatisch vorgenommen oder die Simulation wird abgebrochen.

Danach wird eine Reihe an Hilfsdateien eingelesen: die Hintergrundatmosphäre, Daten zur Berechnung der Absorptions- und Streuquerschnitte, sowie die Wolken- und Albedofelder des Modellgebietes. Die gegebenenfalls korrigierten Einstellungen zum Lauf werden anschließend auf dem Bildschirm ausgegeben und der Benutzer erhält hier die Möglichkeit, die Simulation abubrechen.

Wird die Simulation fortgesetzt, werden die Parameter der laufenden Simulation in einer Datei *outputyyy.txt* abgespeichert, wobei *yyy* eine fortlaufende Nummer

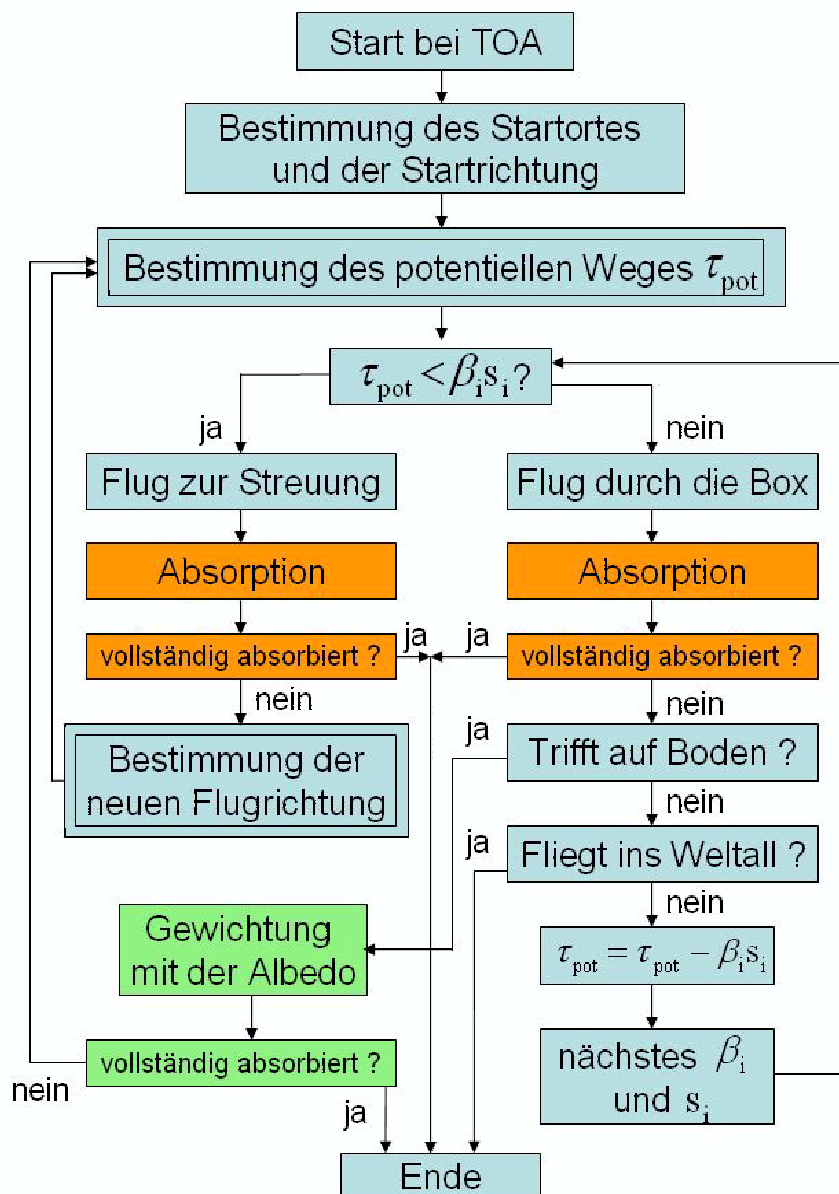


**Abbildung 3.11:** Das Flowchart-Diagramm gibt einen Überblick darüber, in welcher Reihenfolge Promt die einzelnen Schritte der Strahlungstransfer-Simulation bearbeitet. Links steht der Arbeitsschritt, rechts der Name der Routine, in der dieser Arbeitsschritt durchgeführt wird, [eigene Abbildung].

ist. Daher ist es nicht notwendig, dass der Benutzer manuell eine Kopie der in der *control*-Datei aufgeführten Parameter erstellt.

Dann wird eine Wellenlängenschleife gestartet. In ihr werden zuerst die dem Wellenlängenintervall entsprechenden Streu- und Absorptionskoeffizienten sowie die kumulative Phasenfunktion des gesamten Modellgebiets berechnet.

Es folgt die Monte-Carlo-Simulation des Photonenfluges, die schematisch in Abbildung 3.12 dargestellt wird. Während der Monte-Carlo-Simulation werden die Gewichte der Photonen, die auf den Boden treffen, die Gewichte der Photonen, die das Modellgebietes durch den oberen Rand verlassen, und die Gewichte der



**Abbildung 3.12:** Schematischer Überblick der Monte-Carlo-Simulation des Photonenfluges der aktuellen Version von Promt. Die doppelt eingerahmten Boxen beinhalten einen Prozess, der mithilfe einer Zufallszahl bestimmt wird. Im Vergleich zur Simulationsschema von Promt-Rayleigh auf S. 22 werden zusätzlich Absorption (dargestellt in orange) und Reflektion am Untergrund (dargestellt in grün) berücksichtigt, [eigene Abbildung].

Photonen, die die Grenzen der Schichten der Modellatmosphäre passieren sowie das absorbierte Gewicht der Photonen zur anschließenden Auswertung aufsummiert. In der Wellenlängenschleife werden die spektralen Ergebnisse ausgewertet und in Ergebnisdateien geschrieben. Diese werden je nach Einstellung des Benutzers mit dem solaren Spektrum und der CIE-Wirkungsfunktion gewichtet und integriert. Anschließend werden die beschriebenen Berechnungen für das nächste Wellenlängenintervall durchgeführt, bis der gesamte vom Nutzer angegebene Wellenlängenbereich simuliert ist. Zum Schluss werden die über alle Wellenlängenintervalle integrierten Ergebnisse in Dateien gespeichert und eine Statistik über die benötigte Rechenzeit ausgegeben.

Während der Simulation überprüft Prompt die Zwischenergebnisse und schreibt gegebenenfalls Fehlermeldungen. In der Fehlermeldung wird die Art des Fehlers angegeben, in welcher Routine der Fehler aufgetreten ist und die letzten Werte von Laufindizes und Variablen, die zu dem Fehler geführt haben könnten. Das Programm entscheidet in Abhängigkeit der Schwere des Fehlers, ob der Lauf abgebrochen oder fortgesetzt wird. Zur Behebung von Fehlern besteht die Möglichkeit, sich in einer identisch wiederholten Simulation detaillierte Zwischenergebnisse wie Streu- und Absorptionsquerschnitte oder die Flugbahn eines oder mehrerer Photonen ausgeben zu lassen. Insbesondere bei letzteren sollte darauf geachtet werden, dass die ausgegebene Datenmenge nicht zu groß wird, da Prompt durch den zusätzlichen Schreibvorgang auf der Festplatte stark abgebremst wird.

## 3.6 Parallelisierung

Das Monte-Carlo-Verfahren der Strahlungstransfer-Simulation eignet sich hervorragend zur Parallelisierung, da der Flug von verschiedenen Photonen vollkommen unabhängig voneinander simuliert werden kann. Prompt wird mithilfe des *Message Passing Interface MPI* parallelisiert. Dazu werden die zu simulierenden Photonen gleichmäßig auf die verwendeten Prozessorelemente aufgeteilt. Die Photonen, die ein Prozessor zu simulieren hat, sind weiterhin gleichmäßig über das gesamte Modellgebiet verteilt, da ansonsten inhomogene Bewölkung zu einer nicht ausbalancierten Belastung der Prozessoren führen könnte, siehe Abschnitt 4.3. Nach der Simulation werden die Ergebnisse der einzelnen Prozessoren zu einem Gesamtergebnis zusammengefasst und in eine Datei ausgegeben. Daneben muss darauf geachtet werden, dass der für die Monte-Carlo-Simulation verwendete Zufallszahlengenerator auf jedem Prozessor anders initialisiert wird. Das Einlesen der *control*-Datei und der Datenbanken sowie die Berechnung der optischen Eigenschaften werden nicht parallelisiert. Die Ausgabe von Statusmeldungen auf dem Bildschirm wird nur von einem Prozessor durchgeführt, und interaktive Eingaben durch den Nutzer werden von ihm an die anderen Prozessoren weitergeleitet.

Eine weitere mögliche Strategie der Parallelisierung mithilfe einer Gebietsaufteilung wird in Kapitel 5.5 beschrieben. Deren Vorteile greifen jedoch erst, wenn große Modellfelder untersucht werden, oder wenn bei einer Kopplung von PALM und Prompt die Wolkenfelder direkt von Prompt übernommen werden, ohne diese im Arbeitsspeicher bewegen zu müssen. Daher ist die hier verwendete Parallelisierungsmethode mithilfe der Aufteilung der Photonen auf die Prozessoren im bisherigen Stadium der Entwicklung des Modells Prompt vollkommen ausreichend und wird daher verwendet, da sie einfacher zu realisieren ist.

# Kapitel 4

## Modellergebnisse und -verifikation

In diesem Kapitel werden die mit Prompt durchgeführten Simulationen und deren Ergebnisse beschrieben. Für ein-dimensionale Simulationen werden die Ergebnisse von Prompt mit Ergebnissen von *libRadtran* (*library for radiative transfer*) verglichen. *libRadtran* ist eine frei verfügbare Sammlung von C- und Fortran-Funktionen und -Programmen für die Berechnung des solaren und thermischen atmosphärischen Strahlungstransfers. Der Vorläufer von *libRadtran* nennt sich *UVSPEC*. Er wurde 1994 von Kylling [31] entwickelt. Kylling und Mayer erweiterten *UVSPEC* zu *libRadtran* und aktualisieren auch *libRadtran* fortlaufend [39]. *libRadtran* beinhaltet mehrere Methoden zur Lösung der Strahlungstransfer-Gleichung:

- die *Diskrete-Ordinaten*-Methode von Stamnes et al. [65], die den Strahlungstransfer für eine vertikal inhomogene, plan-parallele Atmosphäre simulieren kann,
- eine erweiterte Version dieser Methode namens *pseudo spherical discrete ordinate*. Sie berücksichtigt näherungsweise die Krümmung der Erdoberfläche,
- eine Methode namens *polradtran*, die Polarisation beim Strahlungstransfer berücksichtigt und
- die Zwei-Strom-Methode.

*libRadtran* wurde im UV-Bereich für eine große Anzahl von Ozon- und Aerosolbedingungen bei wolkenlosem Himmel gegen Messungen evaluiert [37].

Die Simulationen mit horizontal inhomogenen Modellgebieten können nicht durch ein-dimensionale Modelle erfasst werden. Daher werden andere drei-dimensionale Monte-Carlo-Modelle zum Vergleich herangezogen.

Für jeden Lauf werden zuerst die Motivation und die Parameter des Laufs beschrieben. Im Folgenden wird das erzielte Ergebnis dargestellt und interpretiert. In allen Rechnungen wird eine aerosolfreie Atmosphäre angenommen. Insofern es nicht anders im Text der Simulation beschrieben ist, rechnet Prompt mit einer spektralen Auflösung von 1 nm.

Im letzten Abschnitt wird die statistische Simulationsgenauigkeit des Monte-Carlo-Verfahrens sowie der Rechenzeitbedarf von Prompt diskutiert. Für alle in diesem Kapitel beschriebenen Simulationen wird die Photonenzahl so groß gewählt, dass der zu untersuchende Effekt wesentlich größer als die Simulationsunsicherheit ist.



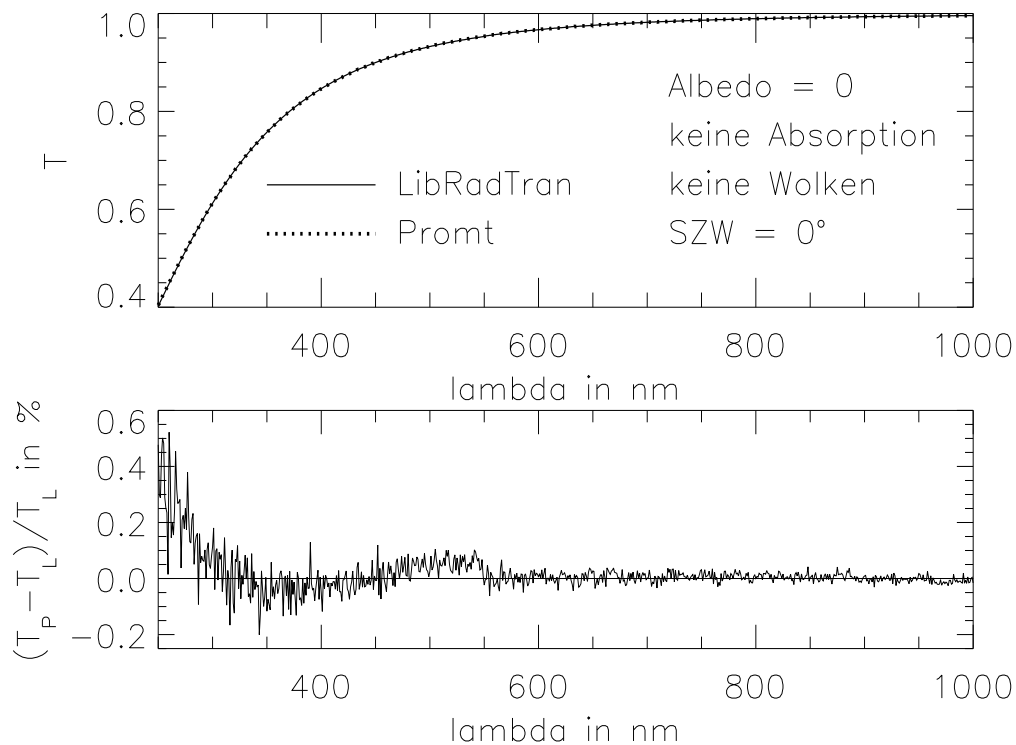
## 4.1 Horizontal homogene Rechnungen

Für die folgenden Läufe wird ein horizontal homogenes Modellgebiet gewählt. Daher können äquivalente Läufe mit dem Modell *libRadtran* durchgeführt werden. Beide Modelle verwenden bei allen Simulationen die aus *libRadtran* stammende US-Standard-Atmosphäre von 1974.

### 4.1.1 Rayleigh-Streuung

Zu Beginn wird die Simulation der Rayleigh-Streuung von Promt überprüft, indem Simulationsergebnisse von Promt mit Ergebnissen von *libRadtran* verglichen werden. Da *libRadtran* mit realen Messungen validiert wurde, kann davon ausgegangen werden, dass die Ergebnisse von *libRadtran* mit hoher Genauigkeit stimmen. Um den Effekt der Rayleigh-Streuung isoliert betrachten zu können, wird ein wolkenloser Himmel und ein vollständig absorbierender Untergrund angenommen. Es wird keine Absorption berücksichtigt. Die Sonne steht im Zenit.

Das obere Diagramm der Abbildung 4.1 zeigt den durch Promt und *libRadtran* simulierten spektralen Transmissionsgrad  $T(\lambda)$ . Da der Rayleigh-Koeffizient pro-



**Abbildung 4.1:** Im oberen Diagramm ist der von Promt simulierte spektrale Transmissionsgrad dargestellt, bei der ausschließlich Rayleigh-Streuung berücksichtigt wird. Im unteren Diagramm wird die relative Abweichung der Promt-Ergebnisse (Index  $P$ ) zum Ergebnis von *libRadtran* (Index  $L$ ) dargestellt, [eigene Abbildung].

portional zu  $\lambda^{-4}$  ist, ist die Wahrscheinlichkeit, gestreut zu werden, für Photonen mit kürzerer Wellenlänge größer als für Photonen längerer Wellenlänge. Damit erhöht sich für kurze Wellenlängen der Anteil der Photonen, die in das Weltall zurückgestreut werden, und der spektrale Transmissionsgrad  $T(\lambda)$  ist niedriger. Daher ist die beobachtete Änderung von  $T(\lambda)$  mit der Wellenlänge plausibel.

Im unteren Diagramm ist die relative Abweichung der Prompt-Ergebnisse zu denen von *libRadtran* dargestellt. Das Ergebnis von *libRadtran* wird hier als Bezugsgröße gewählt, da *libRadtran* validiert ist. Die größten Abweichungen von bis zu 0.6 % treten für  $\lambda < 300 \text{ nm}$  auf. Für  $\lambda > 300 \text{ nm}$  ist die Abweichung kleiner 0.2 %, für  $\lambda > 550 \text{ nm}$  sogar kleiner als 0.1 %. Vorstellbar ist, dass die Ursache für den beobachteten Unterschied die Abhängigkeit der Phasenfunktion der Rayleigh-Streuung von dem Anisotropiefaktor ist, die von Prompt nicht berücksichtigt wird, siehe Abschnitt 5.1.

Auch für andere Sonnenzenitwinkel wird eine Übereinstimmung in der gleichen Größenordnung erreicht. Der durch die Monte-Carlo-Methode hervorgerufene Simulationsfehler verhält sich entsprechend Gleichung (4.2).

### 4.1.2 Absorption durch Gase

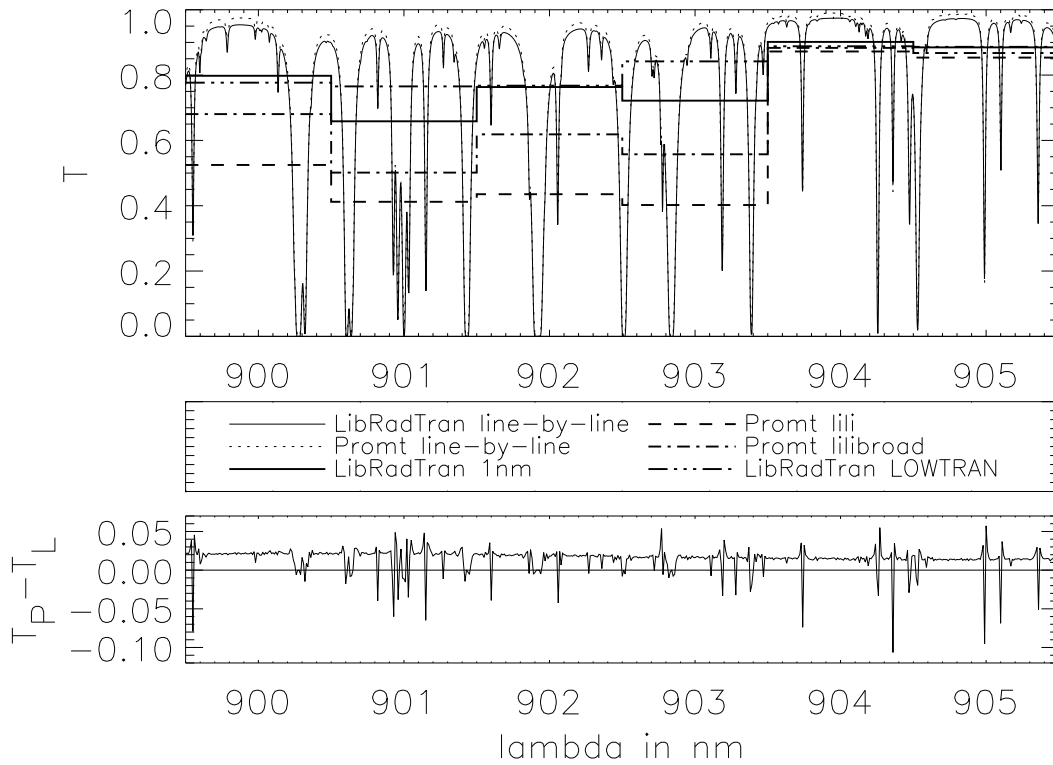
Die folgenden Läufe werden zur Validierung der Simulation der Absorption von Prompt durchgeführt. Bei allen Läufen dieses Abschnitts werden Rayleigh-Streuung und Absorption in einer wolkenfreien Atmosphäre simuliert. Die Sonne steht im Zenit und der Untergrund ist vollständig absorbierend.

#### 4.1.2.1 Mittelungsverfahren des Absorptionskoeffizienten

Abbildung 4.2 zeigt spektral hoch aufgelöst den spektralen Transmissionsgrad  $T(\lambda)$  der Atmosphäre, der mithilfe von verschiedenen Modellen und Verfahren zur Mittelung des Absorptionskoeffizienten simuliert wird. Wird die spektrale Auflösung so hoch gewählt, dass sämtliche Absorptionslinien aufgelöst werden können, so wird die Simulation *line-by-line*-Simulation genannt. In Abbildung 4.2 werden Ergebnisse von *line-by-line*-Simulation des Modells *libRadtran*<sup>1</sup> und von Prompt gezeigt. Das untere Diagramm zeigt, dass der spektrale Transmissionsgrad  $T(\lambda)$  von Prompt um 1.5 bis 2 % über dem von *libRadtran* simulierten liegt. Hingegen simuliert Prompt im Zentrum der Absorptionslinien einen kleineren spektralen Transmissionsgrad  $T(\lambda)$  als *libRadtran*. Dieser Simulationsfehler muss bei der weiteren Entwicklung von Prompt beseitigt werden, da bei dem *line-by-line*-Verfahren keine nähernden Verfahren verwendet werden, und dies somit eine nicht tolerierbare Abweichung ist. Vorstellbar ist, dass es bei der Berechnung des Absorptionskoeffizienten oder des Photonengewichtes zu Rundungsfehlern kommt, die in der Summe zu den beobachteten Abweichungen führen.

*Line-by-line*-Simulationen sind aufgrund der hohen spektralen Auflösung sehr rechenzeitintensiv. Daher sind in Prompt und *libRadtran* Verfahren eingebaut, die einen gemittelten Absorptionskoeffizienten benutzen. In Prompt werden die in Abschnitt 3.2.1 beschriebenen Routinen *lili* und *lilibroad* mit einem Mittelungsintervall von  $\Delta\lambda = 1.0 \text{ nm}$  verwendet. Desweiteren verfügt auch *libRadtran* über einen Modus, in dem durch das Programm LOWTRAN gemittelte Absorptionskoeffizienten verwendet werden. ***libRadtran*-Simulationen, die von LOWTRAN berechnete Absorptionskoeffizienten verwenden, werden im Folgenden LOWTRAN-Simulationen genannt.** Kneizys et al. beschreiben die Version LOWTRAN-6 [43], Pierluissi et al. erweiterten die Absorptionsmodelle in LOWTRAN-7 [45] und [46]. Die spektrale Auflösung von LOWTRAN entspricht im

<sup>1</sup>Die Daten der *line-by-line*-Simulation wurden freundlicherweise von B. Mayer bereit gestellt.



**Abbildung 4.2:** Die Abbildung illustriert verschiedene Verfahren zur Berechnung der Absorption: Die dünnen Linien zeigen Ergebnisse von *line-by-line*-Simulation: Die durchgezogene Linie zeigt das Ergebnis von *libRadtran*, das mit einer spektralen Auflösung von  $\Delta\lambda = 0.015$  nm bis 0.018 nm berechnet wird, die dünne gestrichelte Linie das Ergebnis von Promt, das mit einer Auflösung von  $\Delta\lambda = 0.010$  nm simuliert wird. Im unteren Diagramm ist die Differenz der beiden *line-by-line*-Simulationen aufgetragen. Verfahren, die gemittelte Absorptionskoeffizienten benutzen, sind mit dicken Linien eingezeichnet. Das mit lili erzielte Ergebnis ist gestrichelt, das mit lilibroad erzielte mit strich-punktiert gekennzeichnet, siehe Abschnitt 3.2.1. Das Ergebnis von *libRadtran*, das unter Verwendung von durch LOWTRAN gemittelten Absorptionskoeffizienten erzielt wird, ist strich-punkt-punktiert gezeichnet. Als Referenz wird die mit *libRadtran* durchgeführte *line-by-line*-Simulation auf die spektrale Auflösung der Näherungslösungen skaliert. Sie ist in Abbildung mit einer dicken durchgezogenen Linie eingezeichnet, [eigene Abbildung].

sichtbaren Wellenlängenbereich einer Auflösung von 5 nm und im infraroten Bereich einer Auflösung von 200 nm [53].

Die mit *libRadtran* durchgeführte *line-by-line*-Simulation wird auf eine spektrale Auflösung von  $\Delta\lambda = 1.0$  nm skaliert, damit sie direkt mit den Näherungsverfahren vergleichbar ist.

Die Absorption wird in dem betrachteten Wellenlängenbereich von 900 bis 905 nm von den beiden Promt-Läufen überschätzt: bei der Verwendung von durch lili berechneten Absorptionskoeffizienten um bis zu 35 %, bei Verwendung von lilibroad um bis zu 15 % im Vergleich zur exakten *line-by-line*-Simulation von *libRadtran*. Die Ergebnisse der *libRadtran*-Simulation, die LOWTRAN-Daten verwendet, weichen um bis zu 10 % von der exakten *libRadtran*-Simulation ab.

Alle verwendeten Verfahren zur Mittelung des Absorptionskoeffizienten sind Näherungen. Daher ist ein Simulations-Fehler in Abhängigkeit vom Mittelungsintervall zu erwarten. Für beide in Promt verwendeten Verfahren nähern sich die Ergebnis-

se für kleiner werdende Mittelungsintervalle dem Ergebnis der durch Promt simulierten *line-by-line*-Simulation an. Die Abweichung zur *line-by-line*-Simulation ist dabei von dem Verfahren abhängig. Die Routine *lili*, die den gemittelten Absorptionskoeffizient durch Mittelung des Absorptionsquerschnitts berechnet, ist nach Scheirer [55] nur für sehr engbandige Simulationen zu verwenden. Die durchgeführten Simulationen zeigen, dass für ein Mittelungsintervall von  $\Delta\lambda = 1.0\text{ nm}$  die durch *lili* simulierte Absorption stark überschätzt wird. Bei der Routine *lilibroad* ist die Abweichung zur *line-by-line*-Simulation deutlich geringer. Die Berechnung des gemittelten Absorptionskoeffizienten ist im Vergleich zu *lili* wesentlich rechenzeitintensiver. Die Berechnung der fünf in diesen Simulationen verwendeten Absorptionskoeffizienten dauerte mit *lili* 80s und mit *lilibroad* 510s. Da in Promt jedoch die Möglichkeit des Abspeicherns bereits errechneter Absorptionskoeffizienten besteht und daher diese Rechenzeit nur einmalig aufgewendet werden muss, wird empfohlen, die Routine *lilibroad* zu verwenden. Die spektrale Auflösung muss je nach Anspruch an die Simulationsgenauigkeit gewählt werden.

Der LOWTRAN-Lauf simuliert den spektralen Transmissionsgrad in dem betrachteten Wellenlängenbereich besser als die beiden Promt-Simulationen. Ist dies für größere spektrale Bereiche der Fall, so könnte die Verwendung von Absorptionskoeffizienten von LOWTRAN die Simulationsgenauigkeit von Promt erhöhen. Daher wird in den folgenden Abschnitten die Genauigkeit von *lilibroad* und LOWTRAN für den solaren Strahlungstransfer untersucht.

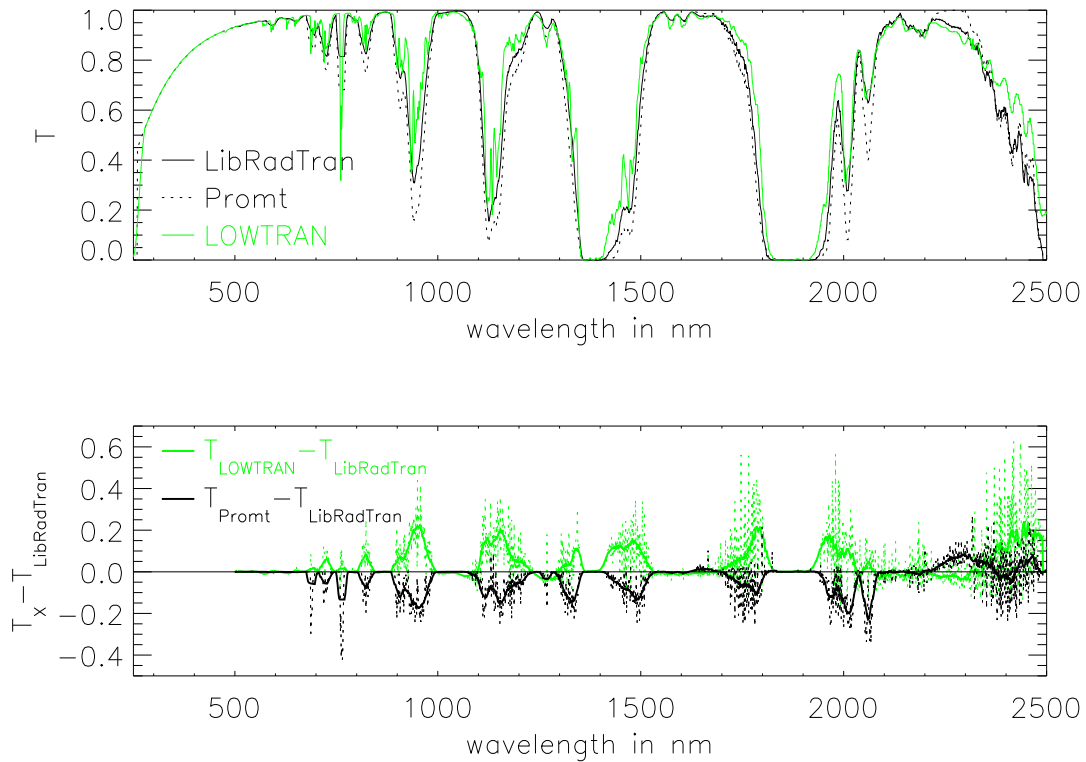
#### 4.1.2.2 Absorption ohne Ozon

In diesem Kapitel wird die Genauigkeit der Absorptionssimulation unter der Verwendung von LOWTRAN-Absorptionskoeffizienten und unter der Verwendung von durch *lilibroad* berechneten Absorptionskoeffizienten im Wellenlängenbereich von 250 nm bis 2500 nm verglichen. Als Referenz dient eine *line-by-line*-Rechnung von *libRadtran*<sup>2</sup>. Die hier verglichenen Modelle simulieren die Absorption durch  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{CO}_2$  und  $\text{O}_2$ . Die Absorption durch Ozon hingegen wird in der *line-by-line*-Simulation nicht berücksichtigt, und auch die von Scheirer entwickelten Routinen berücksichtigen die Absorption durch Ozon im UV- und sichtbaren Bereich nicht. **Daher wird zuerst ein Vergleich durchgeführt, bei dem alle Modelle die Absorption von Ozon nicht berücksichtigen.** Die *line-by-line*-Simulation von *libRadtran* ist erst ab 500 nm verfügbar.

Im oberen Diagramm der Abbildung 4.3 wird der von *libRadtran*, Promt und LOWTRAN simulierte spektrale Transmissionsgrad dargestellt.

Die Bereiche völliger Absorption und Transparenz stimmen in allen Modellen gut überein. Die von Promt und LOWTRAN berechneten spektralen Transmissionsgrade weichen jedoch für einzelne Wellenlängen stark von der exakten *line-by-line*-Berechnung ab. Dabei hat LOWTRAN die Tendenz, den spektralen Transmissionsgrad zu überschätzen, Promt hingegen unterschätzt ihn in den meisten Fällen. Von 500 bis 2500 nm integriert simuliert Promt eine Bestrahlungsstärke von  $800.1\text{ W/m}^2$ , die exakte *line-by-line* von *libRadtran*  $830.9\text{ W/m}^2$  und LOWTRAN  $859.5\text{ W/m}^2$ . Da die Simulationsungenauigkeit bei Verwendung von LOWTRAN-Absorptionskoeffizienten und über 1 nm gemittelten Absorptionskoeffizienten der

<sup>2</sup>Die Daten der *line-by-line* von *libRadtran* wurden freundlicherweise von B. Mayer bereit gestellt.



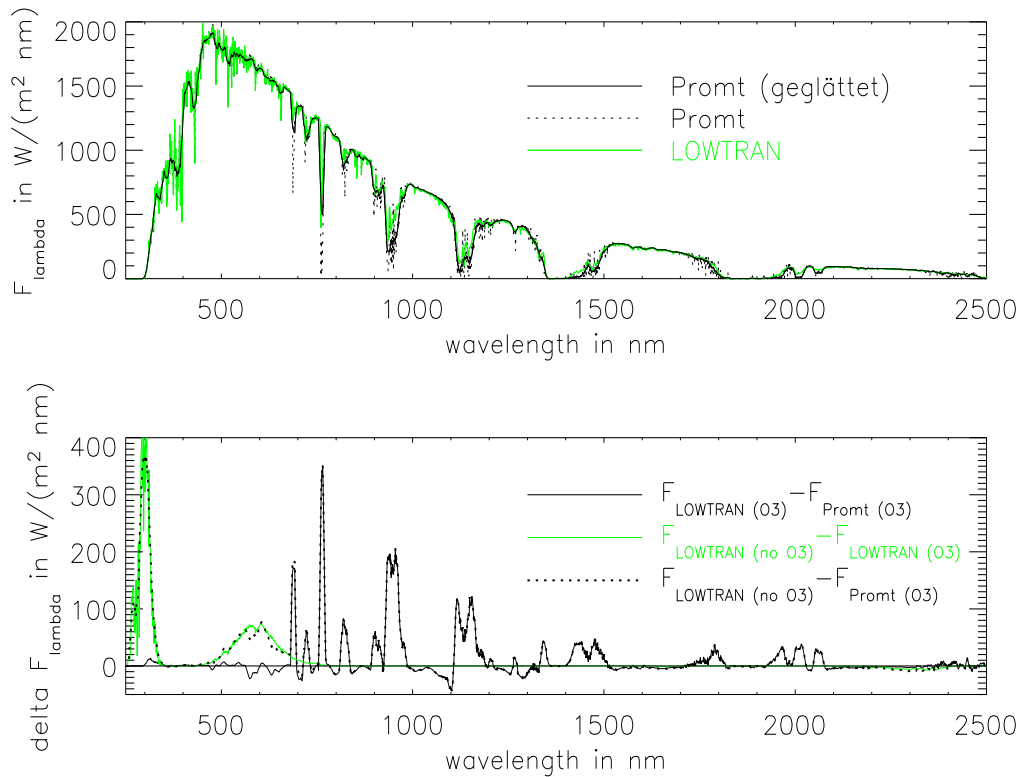
**Abbildung 4.3:** Die Abbildung zeigt im oberen Diagramm die spektralen Transmissionsgrade verschiedener Modelle, wobei die Absorption durch  $H_2O$ ,  $CO_2$  und  $O_2$  berücksichtigt wird. Es sind eine *line-by-line*-Simulation von *libRadtran* und zwei Simulationen von Prompt mit verschiedenen Näherungsverfahren zur Darstellung der Absorption und eine *libRadtran*-Simulation, die LOWTRAN-Absorptionskoeffizienten verwendet, eingezeichnet. Die *line-by-line*- sowie das Prompt-Ergebnis werden über 20 nm geglättet dargestellt. Im unteren Diagramm wird die Differenz zwischen den Näherungslösungen zu der exakten *line-by-line*-Simulation gezeigt, [eigene Abbildung].

Routine lilibroad nahezu gleich groß ist, wird weiterhin lilibroad in Prompt verwendet, um gemittelte Absorptionskoeffizienten zu berechnen.

#### 4.1.2.3 Absorption inklusive Ozon

Ozon ist im UV- und sichtbaren Wellenlängenbereich ein wichtiger Absorber. Prompt berücksichtigt daher zusätzlich zu den in der HITRAN-Datenbank enthaltenen Ozon-Absorptionslinien im Infraroten auch die Hartley-, Huggins- und Chappuisbanden. Die dazu in Prompt verwendeten Absorptionsquerschnitte wurden von Burrows [6] für  $250\text{ nm} < \lambda < 790\text{ nm}$  vermessen, siehe Abbildung 3.6. Da nur die Messreihe für eine Temperatur von  $T = 241\text{ K}$  lückenlos vorhanden war, wird in Prompt angenommen, dass Ozon in jeder Höhe diese Temperatur hat. Bis auf die Berücksichtigung von Ozon gleichen die Parameter der in diesem Abschnitt durchgeführten Simulationen denen des letzten Abschnitts. Die Sonne steht im Zenit, der Boden ist vollständig absorbierend und die Atmosphäre wolkenfrei. Es liegt bedauerlicherweise keine *line-by-line*-Simulation vor, die die Absorption durch Ozon berücksichtigt. Daher können nur die Ergebnisse von Prompt und LOWTRAN miteinander verglichen werden. Das obere Diagramm von Abbildung

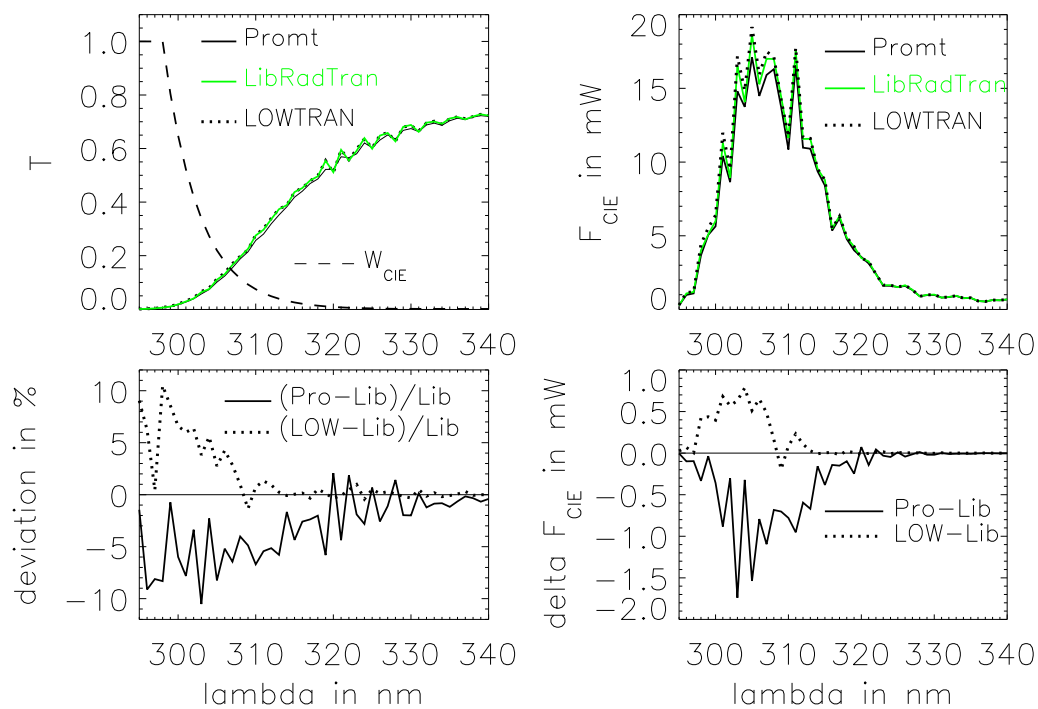
4.4 zeigt die von Prompt und LOWTRAN simulierte spektrale Bestrahlungsstärke  $F_\lambda$  am Boden. Im unteren Diagramm ist die Differenz der beiden Simulationsergeb-



**Abbildung 4.4:** Im oberen Diagramm sind die von Prompt und *libRadtran* unter Verwendung der LOWTRAN-Absorptionskoeffizienten simulierte Bestrahlungsstärken aufgetragen, die zur erhöhten Übersicht über ein Intervall von 10 nm geglättet dargestellt ist. Bei der Simulation wird die Absorption von Wasserdampf, Kohlendioxid, molekularem Sauerstoff und Ozon sowie die Rayleigh-Streuung berücksichtigt. Im unteren Diagramm wird die Differenz der Modellergebnisse sowie die Differenz der Ergebnisse untereinander sowie die Differenzen der Ergebnisse zu einem *libRadtran*- LOWTRAN Referenzlauf, der die Absorption von Ozon nicht berücksichtigt, gezeigt, [eigene Abbildung].

nisse aufgetragen. Die gepunktete Linie und die graue Linie zeigen die Differenz zu einer LOWTRAN-Simulation, bei der kein Ozon berücksichtigt wird. Auch sämtliche Differenzen sind über ein Intervall von 10 nm geglättet dargestellt. Die Differenzen zwischen den Läufen mit und ohne Berücksichtigung von Ozon zeigen den durch Ozon absorbierten Anteil der Bestrahlungsstärke. Hierbei haben beide Modelle eine qualitativ gute Übereinstimmung. Wird Ozon berücksichtigt, so ist die Differenz der beiden Modelle für  $\lambda < 550 \text{ nm}$  in der gemittelten Darstellung kleiner als  $20 \text{ mW}/(\text{m}^2 \text{ nm})$ . Die Differenzen des Prompt-Laufs zu den beiden LOWTRAN-Simulationen ändern sich für  $\lambda < 790 \text{ nm}$  nicht merklich. Dies zeigt, dass die Ozon-Absorption im infraroten Bereich eine untergeordnete Rolle spielt. Durch die Gewichtung mit der solaren Bestrahlungsstärke sind die Differenzen im Bereich von  $690 \text{ nm} < \lambda < 1200 \text{ nm}$  größer als die für  $\lambda > 1200 \text{ nm}$ , vergleiche mit Abbildung 4.3. Wird über den betrachteten Wellenlängenbereich integriert, der in guter Näherung den solaren Strahlungstransfer abdeckt, simuliert Prompt eine Bestrahlungsstärke von  $F_P = 1062.74 \text{ W}/\text{m}^2$ , LOWTRAN hingegen  $F_L = 1083.99 \text{ W}/\text{m}^2$ .

Nach den Ergebnissen des letzten Abschnitts liegt der wahre Wert wahrscheinlich dazwischen. Die Bestrahlungsstärke wird daher von Prompt bei Verwendung von über  $1\text{ nm}$  gemittelten Absorptionskoeffizienten mit einer Unsicherheit von 10 bis  $20\text{ W/m}^2$  simuliert. Werden wie zum Beispiel für Klimasimulationen höhere Genauigkeiten benötigt, so muss das Mittelungsintervall des Absorptionsquerschnitts entsprechend verkleinert werden bis hin zu einer *line-by-line*-Simulation. Mit der Berücksichtigung der Ozonabsorption erschließt sich ein Anwendungsgebiet für Prompt, die Simulation der Erythem-wirksamen Bestrahlungsstärke. Der Fokus der Betrachtung wird im Folgenden auf den UV-Bereich gelegt. Abbildung 4.5 zeigt im Diagramm oben links den spektralen Transmissionsgrad für 295 bis  $340\text{ nm}$ . Es werden drei Modelle verglichen: Prompt, *libRadtran*, mit der



**Abbildung 4.5:** Die Abbildung zeigt schematisch die Berechnung der Erythem-wirksamen Bestrahlungsstärke. Im Diagramm oben links wird der durch Prompt, *libRadtran* und der durch *libRadtran*- LOWTRAN simulierte spektrale Transmissionsgrad und die Wirkungsfunktion des Erythems dargestellt. Im Diagramm unten links wird die prozentuale Abweichung von LOWTRAN und Prompt zu *libRadtran* gezeigt. Im Diagramm oben rechts wird die Erythem-gewichtete spektrale Bestrahlungsstärke abgebildet, und im Diagramm unten rechts die Differenz dergleichen zwischen den verschiedenen Modellen, [eigene Abbildung].

Grundeinstellung zur Berechnung des Absorptionskoeffizienten, und *libRadtran*, das die Absorptionskoeffizienten von LOWTRAN verwendet, dieser Lauf wird kurz LOWTRAN genannt. Das Erythem-wirksame Potential wird durch die CIE-Wirkungsfunktion ausgedrückt, die auch in diesem Diagramm eingezeichnet ist. Im Diagramm unten links ist die relative Abweichung der spektralen Transmissionsgrade dargestellt. *libRadtran* und LOWTRAN stimmen für  $\lambda > 307\text{ nm}$  bis auf 2% überein. Für kürzere Wellenlängen wird von LOWTRAN ein bis zu 10.1% höherer spektraler Transmissionsgrad als von *libRadtran* simuliert. Die Abweichung von Prompt und *libRadtran* ist geringfügig größer, wobei Prompt um bis zu

10.4% kleinere spektrale Transmissionsgrade als *libRadtran* simuliert. Durch Gewichtung des spektralen Transmissionsgrads mit der solaren Bestrahlungsstärke und der CIE-Funktion wird die Erythem-wirksame Bestrahlungsstärke berechnet<sup>3</sup>, die oben rechts dargestellt ist. Ihr maximalen Werte von 15.0 bis 19.1  $mW/(m^2nm)$  wird von allen Modellen im Bereich von 304 bis 312  $nm$  simuliert. Die Differenzen der Erythem-wirksamen spektralen Bestrahlungsstärken, dargestellt im Diagramm unten rechts, ist kleiner als  $2 mW/(m^2nm)$ . Spektral integriert, simuliert Prompt eine Erythem-wirksame Bestrahlungsstärke von 262.05  $mW/m^2$ , *libRadtran* 275.47  $mW/m^2$  und LOWTRAN 281.61  $mW/m^2$ . Somit simuliert Prompt eine 4.8 % geringere und LOWTRAN eine 2.2 % höhere Erythem-wirksamen Bestrahlungsstärke als *libRadtran*. Grund für die Abweichung der Modelle sind wahrscheinlich die verschiedenen Mittelungsverfahren des Absorptionskoeffizienten und die Abhängigkeit des Ozon-Absorptionsquerschnitts von der Temperatur.

### 4.1.3 Homogene Wolkenschichten

In den folgenden Abschnitten werden Ergebnisse von Strahlungstransfer-Simulationen diskutiert, bei denen eine Atmosphäre mit Wolken angenommen wird. Im ersten Teil dieses Abschnitts wird die Simulation der Streuung an den Wolkentröpfchen untersucht. Dazu werden Ergebnisse von Prompt und *libRadtran* miteinander verglichen. Im zweiten Teil wird auch die Absorption durch das Flüssigwasser der Wolken berücksichtigt.

Es werden mit jedem Modell Wolkenschichten mit der Dicke von 1 km, 2 km und 3 km simuliert. Der Flüssigwassergehalt der Wolkenschicht ist  $1 g/m^3$  und der Tropfenradius  $r_0 = 10 \mu m$ . Die Sonne steht im Zenit, der Untergrund ist vollständig absorbierend und neben den Wolken wird auch Rayleigh-Streuung simuliert.

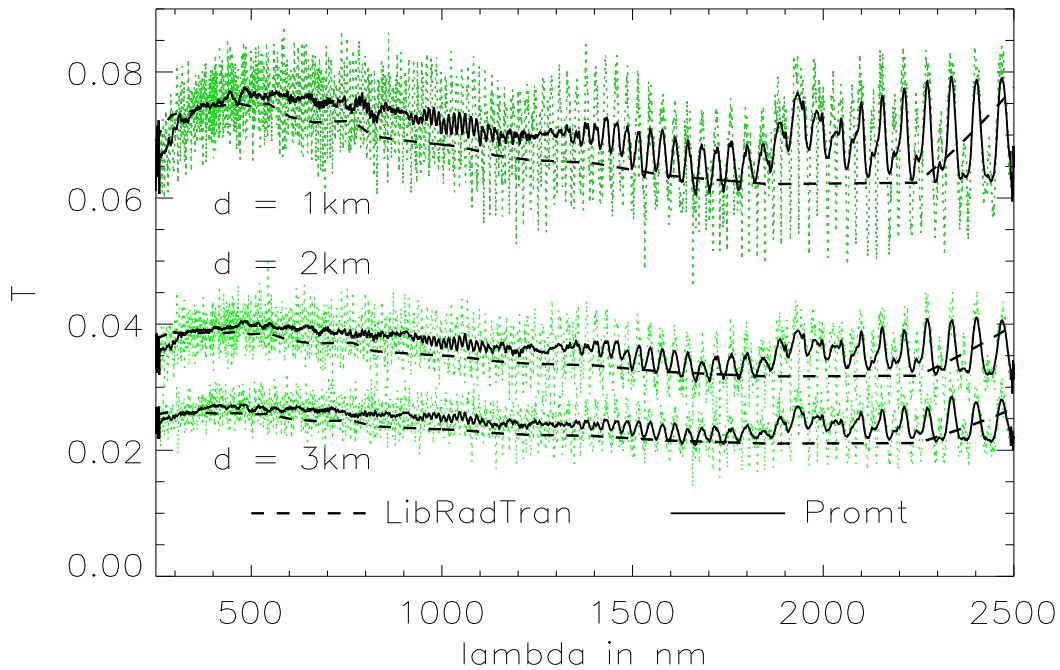
#### 4.1.3.1 Streuung durch Wolken

Im ersten Abschnitt wird die durch die Streuung an den Wolkentröpfchen verursachte Minderung des spektralen Transmissionsgrads bestimmt. Bei den Simulationen wird keine Absorption, weder durch Gase noch durch das Flüssigwasser der Wolke, berücksichtigt.

Abbildung 4.6 zeigt den von Prompt und *libRadtran* simulierten spektralen Transmissionsgrad durch eine Atmosphäre mit horizontal homogenen Wolkenschichten für verschiedene Schichtdicken. Der von *libRadtran* simulierte spektrale Transmissionsgrad hat einen relativ glatten Verlauf, während der von Prompt simulierte spektrale Transmissionsgrad  $\pm$  einen Prozentpunkt im sichtbaren Bereich und  $\pm$  zwei Prozentpunkte im Infraroten um den von *libRadtran* simulierten Wert schwankt. Tabelle 4.1 zeigt den über den gesamten Wellenlängenbereich gemittelten spektralen Transmissionsgrad für die beiden Modelle, wobei Prompt für alle simulierten Schichtdicken einen höheren Wert und somit auch höhere Bestrahlungsstärke als *libRadtran* simuliert. Die Abweichung der simulierten Bestrahlungsstärken ist je nach Schichtdicke 3 bis 5 %. Durch Simulationen mit hoher Photonenzahl wird ausgeschlossen, dass die Schwankungen bei dem von Prompt simulierten Transmissionsgrad durch die statistische Unsicherheit der Monte-Carlo-Methode verursacht

<sup>3</sup>Prompt bietet die Möglichkeit, direkt die Erythem-gewichtete Bestrahlungsstärke ausgeben zu lassen.





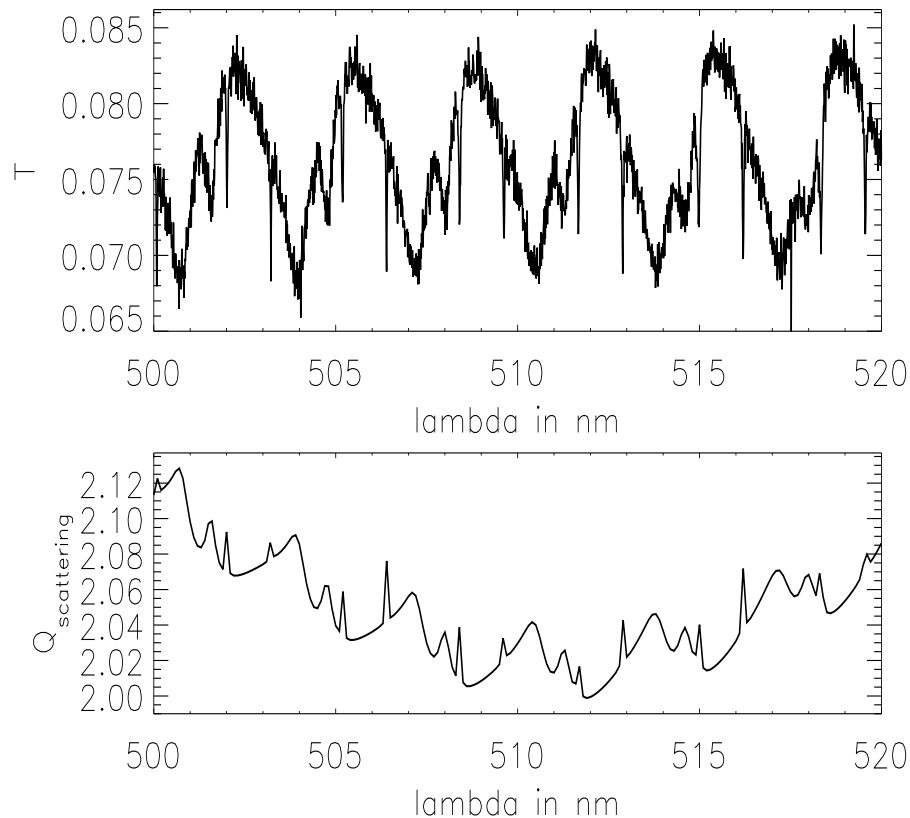
**Abbildung 4.6:** Im Diagramm wird der von Promt und *libRadtran* simulierte spektrale Transmissionsgrad durch Wolkenschichten verschiedener vertikaler Erstreckung  $d$  gezeigt. Bei den Simulationen wird keine Absorption berücksichtigt. Die gepunkteten Linien zeigen das exakte, die durchgezogene Linie das über 10 nm geglättete Ergebnis von Promt, [eigene Abbildung].

werden. Die Hauptursache für die Differenz zwischen den beiden Modellen ist wahrscheinlich das unterschiedliche Verfahren zur Bestimmung des Streuquerschnitts und der Phasenfunktion der Wolkentröpfchen. Promt berechnet diese mithilfe der Mie-Theorie, *libRadtran* hingegen benutzt hierfür eine Parametrisierung von Hu und Stamnes [24]. In Promt wird dabei angenommen, dass alle Tropfen exakt den Radius  $r_0 = 10\text{ }\mu\text{m}$  haben. Bei bestimmten Verhältnissen von Tropfenradius zu Wellenlänge kommt es zu konstruktiven oder destruktiven Interferenzen, die die Schwankungen des spektralen Transmissionsgrads erklären könnten. Eine Simulation mit einer spektralen Auflösung von  $0.01\text{ nm}$  ergibt, dass die relativen Minima des spektralen Transmissionsgrads bei den gleichen Wellenlängen auftreten wie die relativen Maxima der Streueffizienz, siehe Abbildung 4.7. Gut erkennbar sind insbesondere die entgegengesetzten Schwingungen mit einer Periode von ca.  $3.5\text{ nm}$ . Nicht alle Änderungen des Verlaufs der Streueffizienz sind in dem des spektralen Transmissionsgrads wiederzufinden, da neben der Streueffizienz auch die wellenlängenabhängige Phasenfunktion einen Einfluss auf den spektralen Transmissionsgrad hat. Die in *libRadtran* verwendete Parametrisierung hingegen nimmt ein Tropfenspektrum an, dessen effektiver Radius  $r_{\text{eff}} = 10\text{ }\mu\text{m}$  ist<sup>4</sup>. Da die Interferenzen für unterschiedliche Tropfengrößen bei anderen Wellenlängen auftreten, ist der Verlauf der Streukoeffizienten bezüglich der Wellenlänge glatt.

<sup>4</sup>Der effektive Radius ist der Radius des Tropfens, dessen optische Eigenschaften am besten den mittleren Eigenschaften des gesamten Tropfenspektrums entsprechen.

$d$ in km	$\overline{T}_P$	$\overline{T}_L$	$\sigma_{(T_P-T_L)}$	$F_P$ in $W/m^2$	$F_L$ in $W/m^2$
1	7.064	6.746	0.782	97.00	93.43
2	3.645	3.456	0.437	50.31	47.99
3	2.454	2.303	0.316	33.87	32.02

**Tabelle 4.1:** Die Tabelle gibt in der zweiten und dritten Spalte von links den durch Prompt (Index  $P$ ) und *libRadtran* (Index  $L$ ) simulierte gemittelten spektralen Transmissionsgrad  $\overline{T}$  in  $10^{-2}$  für homogene Wolkenschichten verschiedener Dicke  $d$  an. Die Absorption wird bei diesen Simulationen nicht berücksichtigt. Die Wolken haben einen Flüssigwassergehalt von  $1\text{ g/m}^3$ . In der nächsten Spalte steht das quadratische Mittel der Differenz der Modellergebnisse in  $10^{-2}$ . Die Ergebnisse dieser Tabelle werden aus den in Abbildung 4.6 dargestellten Simulationen berechnet.

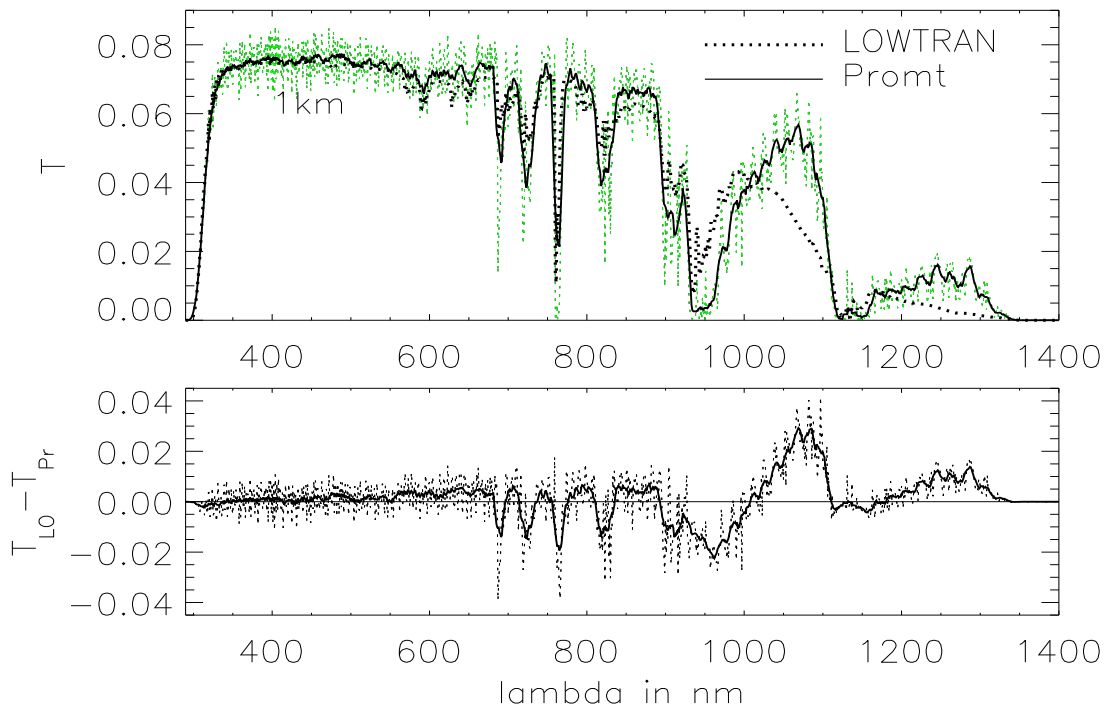


**Abbildung 4.7:** Im oberen Diagramm ist der von Prompt simulierte spektrale Transmissionsgrad durch eine 1 km dicke Wolkenschicht dargestellt, im unteren Diagramm die Streueffizienz der Wolkentropfen. Die relativen Maxima des spektralen Transmissionsgrads befinden sich bei den Wellenlängen, bei denen die Streueffizienz relative Minima hat, [eigene Abbildung].

### 4.1.3.2 Absorption durch Wolken

Wasser ist im Infraroten nicht transparent wie im sichtbaren Wellenlängenbereich, sondern absorbiert einen Teil der Photonen. Um zu überprüfen, ob Promt die Absorption durch Wolken im Infraroten richtig darstellt, werden mit Promt und LOWTRAN Simulationen durchgeführt, bei denen Streuung und Absorption der Wolken simuliert werden. Neben den Wolken werden auch Rayleigh-Streuung und die Absorption durch Gase simuliert, die Sonne steht im Zenit und der Boden ist vollständig absorbierend.

Das obere Diagramm von Abbildung 4.8 zeigt den spektralen Transmissionsgrad durch eine 1 km dicke horizontale homogene Wolkenschicht mit einem Flüssigwassergehalt von  $1 \text{ g/m}^3$ . Für  $\lambda < 304 \text{ nm}$  ist der spektrale Transmissionsgrad  $T(\lambda)$



**Abbildung 4.8:** Die Abbildung zeigt den von Promt und *libRadtran*-LOWTRAN simulierten spektralen Transmissionsgrad durch eine 1 km dicke Wolkenschicht. Bei der Simulation wird sowohl die Absorption durch  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{O}_2$  und  $\text{O}_3$  als auch die des Wolkenwassers berücksichtigt. Im oberen Diagramm ist das ungemittelte Promt-Ergebnis grau gepunktet dargestellt, und durchgezogen das gleitende Mittel über 20 nm. Im unteren Diagramm ist die Differenz der Modellergebnisse gepunktet und das gleitende Mittel über 20 nm durchgezogen dargestellt, [eigene Abbildung].

kleiner 1 %. Für  $\lambda > 304 \text{ nm}$  steigt  $T(\lambda)$  rasch auf etwa 7 % bei  $\lambda = 323 \text{ nm}$  an. Für  $\lambda > 550 \text{ nm}$  treten Absorptionslinien auf. Für  $\lambda > 900 \text{ nm}$  ist  $T(\lambda)$  durchgängig deutlich kleiner als bei der Simulation ohne Berücksichtigung der Absorption, siehe Abbildung 4.6, und für  $\lambda > 1357 \text{ nm}$  bleibt sie unter 0.5 %.

Die Absorption im UV-Bereich wird durch Ozon und die Absorptionslinienstruktur für  $\lambda > 550 \text{ nm}$  durch Absorptionslinien von Wasserdampf und Sauerstoff hervorgerufen, vergleiche mit Abbildung 4.4. Im sichtbaren Bereich sind die Wolken nicht absorbierend. Der Wert des spektralen Transmissionsgrads von etwa 7 % entspricht dem Wert, der sich auch bei den Simulationen ohne Berücksichtigung der Absorption ergibt. Im Infraroten hingegen ist Wasser absorbierend,  $T(\lambda)$  ist daher im

$d$ in $km$	$F_P$ in $W/m^2$	$F_L$ in $W/m^2$
1	64.31	63.22
2	29.30	29.07
3	17.97	17.88

**Tabelle 4.2:** Die von Prompt (Index  $P$ ) und *libRadtran* (Index  $L$ ) simulierte Bestrahlungsstärke  $F$  am Boden, angegeben in  $W/m^2$ , für homogene Wolkenschichten der Dicke  $d$  mit einem Flüssigwassergehalt von  $1 g/m^3$ .

Infraroten sehr klein, vergleiche mit Abbildung 3.10.

Im unteren Diagramm ist die Differenz der beiden Modelle zu sehen. Für  $\lambda < 650 nm$  ist die Abweichung der beiden Modelle kleiner als  $\pm 1.2$  Prozentpunkte. Im Bereich von  $650 nm < \lambda < 880 nm$  werden die schmalen Absorptionslinien durch Prompt ausgeprägter simuliert als durch LOWTRAN. Auch in den breiteren Bereichen  $920 nm < \lambda < 1000 nm$  und  $1100 nm < \lambda < 1200 nm$  simuliert Prompt die Gas-Absorption stärker als LOWTRAN, wie auch in Abschnitt 4.1.2.3 festgestellt wird. Die Absorption durch Wolkenwasser überlagert sich mit der Absorption durch Gase. Sie führt zu einer stetigen Abnahme des spektralen Transmissionsgrads. Prompt simuliert im Vergleich zu LOWTRAN eine geringere Absorption durch Wolkenwasser. Da Prompt eine größere Absorption durch Gase und eine geringere Absorption durch Wolkenwasser simuliert, heben sich diese Effekte zum Teil gegenseitig auf. Daher weichen die von Prompt und LOWTRAN simulierten Bestrahlungsstärken am Boden, siehe Tabelle 4.2, um weniger als  $1.1 W/m^2$  voneinander ab. Simulationen von Prompt und LOWTRAN für 2 km und 3 km dicke Wolkenschichten zeigen im spektralen Vergleich die gleichen Unterschiede wie die Ergebnisse für die 1 km dicke Wolkenschicht und Prompt simuliert auch für diese Wolkenschichtdicken eine höhere Bestrahlungsstärke als LOWTRAN.

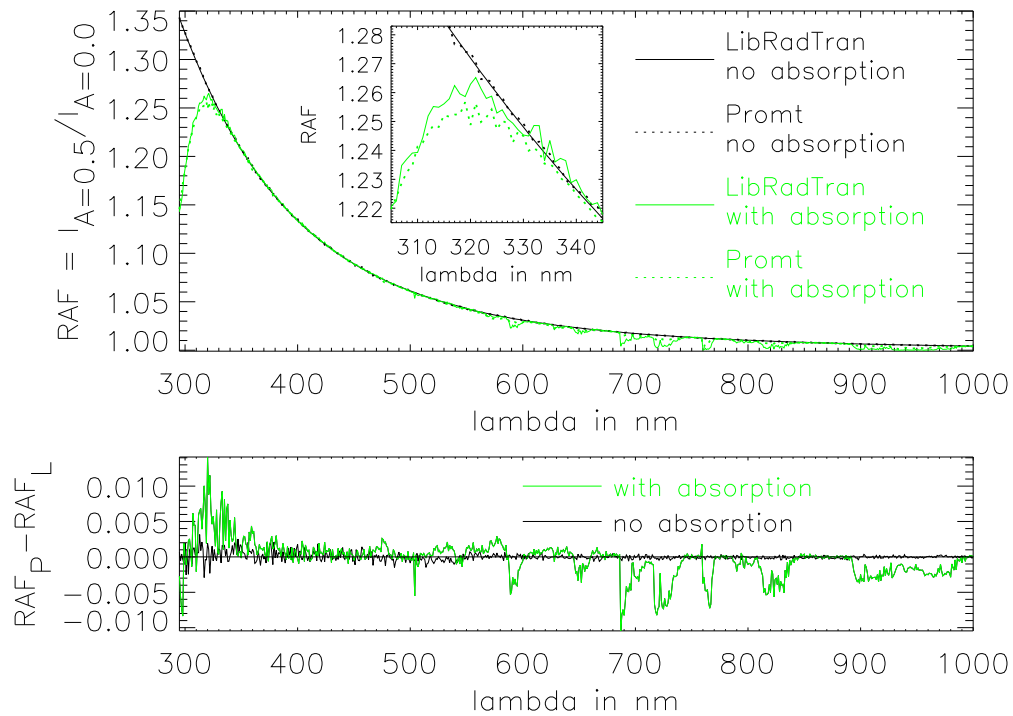
#### 4.1.4 Albedo

Die folgenden Läufe dienen zur Validierung der Simulation der Reflektion am Untergrund. Es wird jeweils ein Lauf mit einer Albedo von  $A = 0.0$  und ein Lauf mit  $A = 0.5$  für eine wolkenfreie Atmosphäre durchgeführt, die Sonne steht im Zenit. Das Verhältnis der Bestrahlungsstärke für einen reflektierenden Untergrund zu der eines vollständig absorbierenden Untergrundes wird als Strahlungsüberhöhung (RAF englisch *radiation amplification factor*) bezeichnet

$$RAF = \frac{I_{A=0.5}}{I_{A=0.0}}. \quad (4.1)$$

In Abbildung 4.9 ist der  $RAF$  in Abhängigkeit von der Wellenlänge aufgetragen. Die schwarzen Linien zeigen den  $RAF$  für eine nicht absorbierende Atmosphäre, die grauen Linien den  $RAF$  für eine absorbierende Atmosphäre.

Im nicht absorbierenden Fall nimmt der  $RAF$  mit kürzer werdender Wellenlänge stetig zu. Dies ist plausibel, da aufgrund des hohen Rayleigh-Streuquerschnitts für kurze Wellenlängen ein größerer Anteil der vom Boden reflektierten Photonen gestreut wird, und somit nochmals zur Einstrahlung am Boden beitragen kann. Die Abweichungen zwischen Prompt und *libRadtran* liegen für die nicht absorbierende



**Abbildung 4.9:** Das obere Diagramm zeigt die von Promt und *libRadtran* simulierte Strahlungsüberhöhung, die durch eine Albedo  $A = 0.5$  hervorgerufen wird. Die schwarzen Linien zeigen das Simulationsergebnis für eine nicht absorbierende Atmosphäre, die grauen das Ergebnis unter Berücksichtigung der Absorption. Im unteren Diagramm ist die Differenz der Simulationsergebnisse dargestellt, [eigene Abbildung].

Atmosphäre im Bereich von einigen Promille. Hauptsächlich sind die Unterschiede zwischen den Modellergebnissen auf die statistische Simulationsunsicherheit des Monte-Carlo-Verfahrens zurückzuführen, jedoch können auch die geringen bei der Rayleigh-Streuung auftretenden Unterschiede, siehe Abbildung 4.1, zu den Abweichungen des  $RAF$  beitragen. Die erzielte Übereinstimmung ist jedoch weiterhin so hoch, dass eine korrekte Simulation des Reflektionsprozesses am Boden durch Promt angenommen werden kann.

Wird die Absorption berücksichtigt, so wird ein Teil der Photonen absorbiert, bevor sie nach der Streuung zum Boden zurückkehren können. Im UV-B-Bereich  $280\text{ nm} < \lambda < 315\text{ nm}$  [12] ist die Absorption besonders stark ausgeprägt. Daher hat der  $RAF$  ein Maximum bei etwa  $320\text{ nm}$ , bei der der Rayleigh-Streuquerschnitt groß, die Absorption jedoch noch ausreichend klein ist. Das Maximum des  $RAF$ s wird von beiden Modellen im gleichen Wellenlängenbereich simuliert, jedoch unterscheiden sich die simulierten  $RAF$ -Werte um bis zu  $1.5 \cdot 10^{-2}$ . Die im absorbierenden Fall beobachtete Abweichung ist wahrscheinlich auf die Ungenauigkeit des Mittelungsverfahrens des Absorptionskoeffizienten zurückzuführen, siehe Abschnitt 4.1.2.3, da diese im nicht absorbierenden Fall nicht auftritt.

#### 4.1.5 Zusammenfassung der horizontal homogenen Vergleiche

Die Vergleiche zwischen Promt und *libRadtran* zeigen, dass der Photonenflug unter Berücksichtigung der Rayleigh-Streuung und eines reflektierenden Untergrundes in guter Übereinstimmung mit *libRadtran* simuliert wird. Die Abweichungen zwischen den Modellen sind kleiner als 0.6 %.

Bei der Simulation der Absorption ergeben sich folgende Differenzen zu anderen Modellen: Im Vergleich zu der *line-by-line*-Simulation von *libRadtran* modelliert Promt einen um 1.5 bis 2.1 % höheren spektralen Transmissionsgrad. Es ist vorstellbar, dass die Abweichung durch Rundungsfehler bei der Berechnung des Absorptionskoeffizienten und des Photonengewichts zustande kommt.

Der Vergleich von Simulationen, bei denen gemittelte Absorptionskoeffizienten verwendet werden, mit der *line-by-line*-Simulation von *libRadtran* zeigt, dass die Bestrahlungsstärke am Boden, die bei  $F_P = 1062.74 \text{ W/m}^2$  liegt, um ca. 10 bis  $20 \text{ W/m}^2$  zu gering simuliert wird, wenn über 1 nm gemittelte Absorptionskoeffizienten verwendet werden. Dieser Simulationsfehler liegt in der gleichen Größenordnung wie der einer *libRadtran*-Simulation, die von LOWTRAN errechnete Absorptionskoeffizienten verwendet, wobei diese jedoch die Bestrahlungsstärke überschätzt. Wird die Streuung an den Wolkentröpfchen betrachtet, so zeigt der Vergleich mit *libRadtran*, dass der von Promt simulierte spektrale Transmissionsgrad um bis zu 30 % des von *libRadtran* simulierten Wertes von *libRadtran* abweicht. Da es sich bei den Abweichungen jedoch größtenteils um gleichmäßig um den von *libRadtran* simulierten Wert verteilte Schwingungen handelt, heben sich die Abweichungen im solaren Mittel größtenteils gegenseitig auf. Die von Promt simulierte Bestrahlungsstärke ist um etwa 4 % größer als die von *libRadtran*. Die Darstellung der Wolken ist aufgrund der unterschiedlichen Methoden zur Berechnung ihrer optischen Eigenschaften nur bedingt vergleichbar.

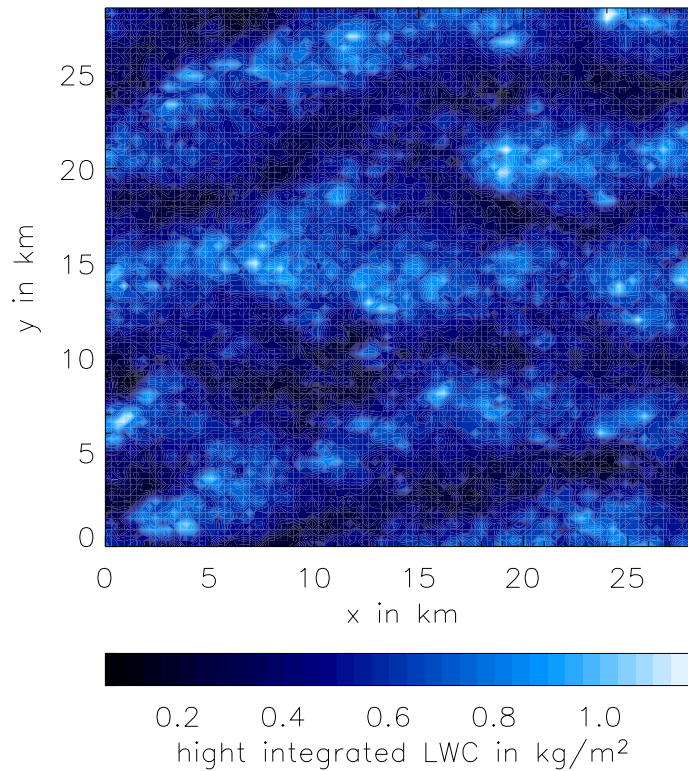
Die Simulation der Absorption durch Wolkenwasser wird von Promt und *libRadtran* unterschiedlich simuliert, wobei Promt eine geringere Absorption simuliert. Bei der Simulation der Bestrahlungsstärke gleichen sich der Effekte der stärkere Absorption durch Gase und der geringeren Absorption durch das Wolkenwasser teilweise gegenseitig aus, so dass sich die simulierten Bestrahlungsstärken bei horizontal homogen bewölktem Himmel um weniger als 1.8 % voneinander unterscheiden.

## 4.2 Horizontal inhomogene Rechnungen

Die Stärke des Monte-Carlo-Simulationsverfahrens liegt darin, beliebige Wolkenformen und Bodeneigenschaften berücksichtigen zu können. Diese können nicht von ein-dimensionalen Modellen erfasst werden, daher ist ein Vergleich mit den ein-dimensionalen Modellen wie den bisher verwendeten Lösungsverfahren aus *libRadtran* nicht mehr möglich. Im ersten Abschnitt werden Simulationsergebnisse für ein drei-dimensionales inhomogenes Wolkenfeld gezeigt, das durch das LES-Modell PALM erzeugt wird. Dankenswerterweise führte Mayer eine Vergleichsrechnung mit dem Modell MYSTIC [38] durch. Im zweiten Abschnitt werden Simulationen durchgeführt, die ein inhomogenes Albedofeld berücksichtigen. Die Ergebnisse werden so dargestellt, dass sie mit Rechnungen von Smolskaia [64] vergleichbar sind.

### 4.2.1 Drei-dimensionale Wolkenfelder

In diesem Abschnitt werden Simulationen von Promt und MYSTIC verglichen, die ein LES-Wolkenfeld berücksichtigen, das von PALM (siehe S. 35) berechnet wird<sup>5</sup>. Das verwendete Gitter hat 96 mal 96 Gitterpunkte horizontal mit einem Gitterpunktabstand von 300 m und eine vertikale Auflösung von 50 m und reicht bis in eine Höhe von 3500 m. Für diesen exemplarischen Vergleich der Monte-Carlo-Modelle wird ein Wolkenfeld verwendet, das nach einer Simulationsdauer von 5 Stunden entstand, da dieses deutlich erkennbare Strukturen im vertikal integrierten Flüssigwassergehalt aufweist, siehe Abbildung 4.10. Bei der Simulati-



**Abbildung 4.10:** Die Abbildung zeigt den vertikal integrierten Flüssigwassergehalt eines von PALM generierten Wolkenfeldes, [eigene Abbildung].

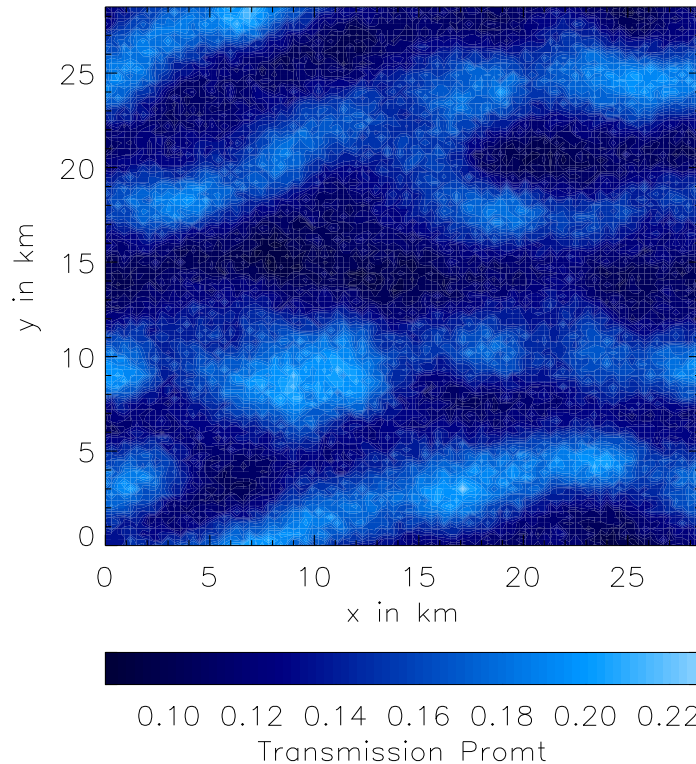
on werden alle Phänomene berücksichtigt, die von Promt erfasst werden können: Rayleigh-Streuung, Absorption durch Wasserdampf,  $CO_2$ ,  $O_2$  und  $O_3$  sowie durch das Flüssigwasser der Wolken und auch die Mie-Streuung an den Wolkentröpfchen. Die Sonne steht im Zenit und der Untergrund ist vollständig absorbierend. Der Vergleich wird im Detail für eine monochromatische Simulationen der Wellenlänge  $\lambda = 550 \text{ nm}$  beschrieben. Weiterhin wird auch kurz auf einen Vergleich von solar integrierten Simulationen eingegangen sowie auf weitere von Promt erzeugte Simulationsergebnisse, für die jedoch kein Vergleich vorliegt.

#### 4.2.1.1 Vergleich der monochromatischen Simulationen

Abbildung 4.11 zeigt den von Promt simulierten spektralen Transmissionsgrad  $T(\lambda)$  für  $\lambda = 550 \text{ nm}$ . Die Strukturen des Wolkenfeldes sind deutlich bei der Ein-

<sup>5</sup>Die LES-Simulation wurde freundlicherweise von H. Jansen durchgeführt.

strahlung wiederzuerkennen, wobei ein großer Flüssigwassergehalt eine geringe Einstrahlung zur Folge hat, vergleiche mit Abbildung 4.10. Das durch MYSTIC



**Abbildung 4.11:** In dem Diagramm wird der von Prompt simulierte spektrale Transmissionsgrad für  $550\text{ nm}$  durch eine Atmosphäre, die das LES-Wolkenfeld aus Abbildung 4.10 enthält, abgebildet, [eigene Abbildung].

simulierte Feld von  $T(\lambda)$  zeigt ein nahezu identisches Bild<sup>6</sup>. Die Differenz des von Prompt und von MYSTIC simulierten spektralen Transmissionsgrades wird in Abbildung 4.12 gezeigt. Die Struktur des Wolkenfeldes ist nicht mehr erkennbar. Dies spricht im großen Maße dafür, dass es sich bei den Differenzen hauptsächlich um den statistischen Fehler des Monte-Carlo-Verfahrens handelt. Die statistische Auswertung der Simulationen wird in Tabelle 4.3 vorgenommen. Die Differenz der

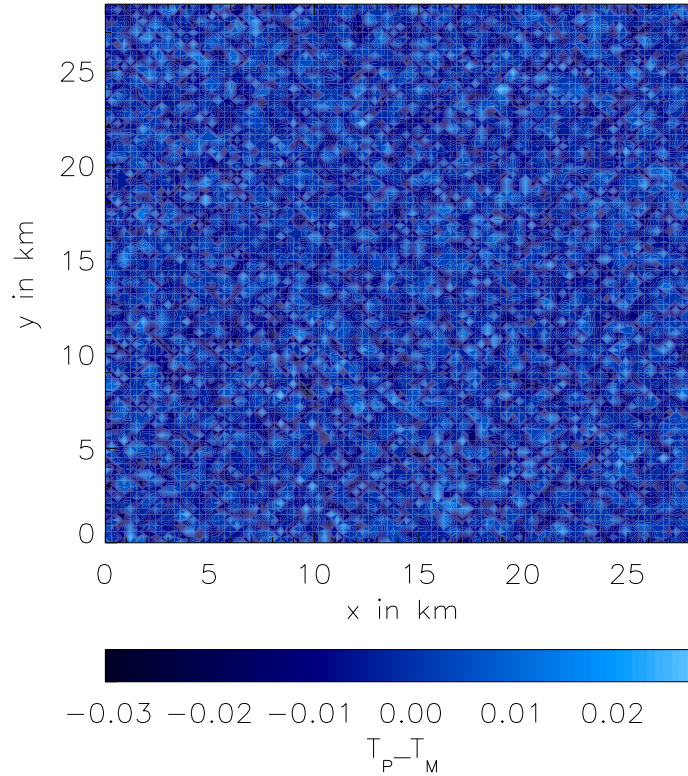
Modell	$\bar{T}$ in $10^{-2}$	$\sigma_{\bar{T}}$ in $10^{-2}$
Prompt	14.273	2.526
MYSTIC	14.457	2.494
Prompt-MYSTIC	-0.184	0.783

**Tabelle 4.3:** In der mittleren Spalte stehen die von Prompt und MYSTIC simulierten, horizontal gemittelten, spektralen Transmissionsgrade durch eine Atmosphäre mit LES-Wolkenfeld für  $\lambda = 550\text{ nm}$ , sowie die horizontal gemittelte Differenz der beiden spektralen Transmissionsgrade. In der rechten Spalte stehen die Standard-Abweichungen der zwei-dimensionalen Felder der in der mittleren Spalte angegebenen Größen.

horizontal gemittelten  $T(\lambda)$  für  $\lambda = 550\text{ nm}$  ist  $0.184 \cdot 10^{-2}$ , wobei Prompt den nied-

<sup>6</sup>Daher lohnt es nicht, es hier nochmals zu zeigen.



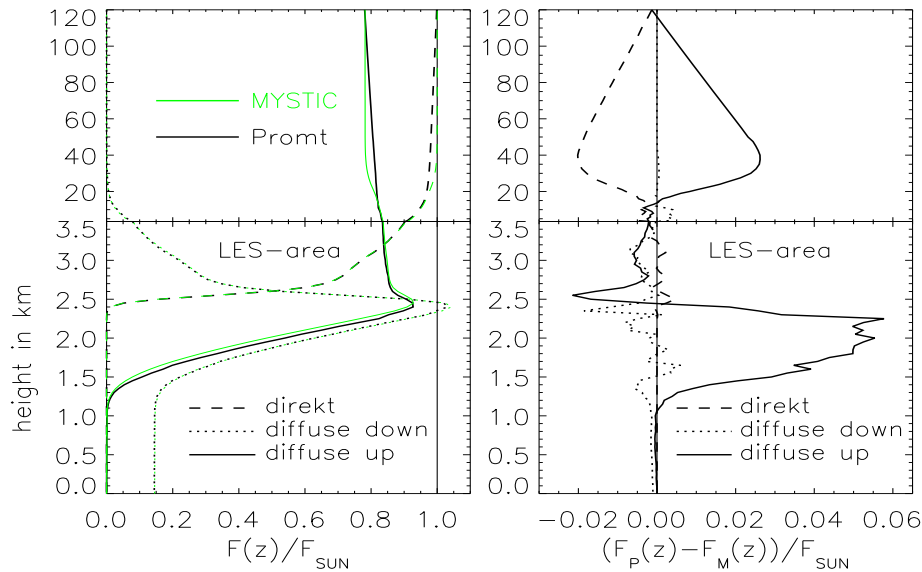


**Abbildung 4.12:** Das Diagramm zeigt die Differenz des von Promt und MYSTIC simulierten Transmissionsgrads durch eine Atmosphäre, die das LES-Wolkenfeld aus Abbildung 4.10 enthält, [eigene Abbildung].

rigeren spektralen Transmissionsgrad simuliert. Das entspricht 1.27 % des von MYSTIC simulierten Wertes. Die Standard-Abweichung des horizontalen spektralen Transmissionsgrads für die einzelnen Simulationen ist ein Maß für die Variabilität der spektralen Bestrahlungsstärke. Sie ist für beide Modelle etwa  $2.5 \cdot 10^{-2}$ . Die von der Monte-Carlo-Methode verursachte Unsicherheit ist für einzelne Pixel größer als für das horizontale Mittel. Tabelle 4.2 zeigt, dass das quadratische Mittel der Differenz der simulierten  $T(\lambda)$  größer als die Differenz der gemittelten  $T(\lambda)$  ist. Dies ist ein weiteres Indiz dafür, dass die durch die Monte-Carlo-Methode verursachte Simulationsunsicherheit größer ist als andere mögliche Abweichungen, die durch Unterschiede der Modellphysik verursacht werden könnten.

Weiterhin werden die horizontal gemittelten Profile der direkten, der diffus aufwärts gerichteten und der diffus nach unten gerichteten relativen Bestrahlungsstärke für  $\lambda = 550 \text{ nm}$  für Promt und MYSTIC miteinander verglichen, siehe Abbildung 4.13. Sobald die Photonen in das Wolkenfeld eindringen, ist die Wahrscheinlichkeit der Streuung sehr hoch. Der direkte Anteil der Strahlung sinkt innerhalb von 1.2 km im LES-Simulationsgebiet auf Null. Die diffuse nach unten gerichtete Strahlung hat ihr Maximum in den oberen Wolkenschichten in einer Höhe von 3250 m. In den unteren Wolkenschichten nimmt ihr Anteil weiter ab. Am Boden hat der gemittelte spektrale Transmissionsgrad den in der Tabelle 4.2 angegebenen Wert von 14.3 %.

Da der Boden als total absorbierend angenommen wird, geht von ihm keine nach oben gerichtete diffuse Strahlung aus. Im Bereich der Wolken steigt ihre Größe rasch an und erreicht ihr Maximum in der gleichen Höhe wie der nach unten gerichtete Anteil der diffusen Strahlung.



**Abbildung 4.13:** Das Diagramm links zeigt die für das Wolkenfeld der Abbildung 4.10 von Promt und MYSTIC simulierten Profile verschiedener horizontal gemittelter Anteile der relativen spektralen Bestrahlungsstärke für  $\lambda = 550 \text{ nm}$ . Sie werden auf die solare Bestrahlungsstärke am Oberrand der Atmosphäre normiert dargestellt. Im rechten Diagramm wird die Differenz der Simulationsergebnisse gezeigt. Man beachte die unterschiedlichen Maßstäbe der Abzisse, [eigene Abbildung].

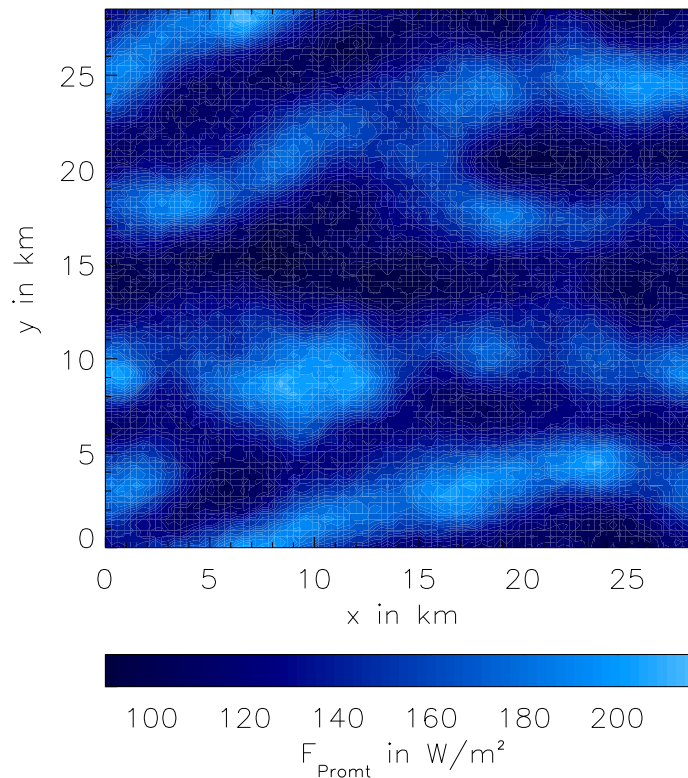
Im rechten Diagramm wird die Differenz der von Promt und MYSTIC simulierten Profile gezeigt. Für  $z > 20 \text{ km}$  ist die von Promt simulierte direkte relative Bestrahlungsstärke kleiner und die diffuse größer, als dies von MYSTIC simuliert wird. In dem LES-Feld treten vor allem Abweichungen beim diffus nach oben gerichteten Strahlungsfluss auf. Wahrscheinlich sind die Differenzen der Modelle - sowohl in der Grenzschicht als auch in der oberen Atmosphäre - auf geringfügige Unterschiede der verwendeten vertikalen Koordinatensystemen zurückzuführen. Promt interpretiert Angaben für eine Höhe als repräsentativ für eine um diese Höhe zentrierte Schicht, MYSTIC hingegen interpretiert sie als repräsentativ für die darüber liegende Schicht.

#### 4.2.1.2 Vergleich der solar integrierten Simulationen

Die im vorangegangenen Abschnitt beschriebene Rechnung kann für jede Wellenlänge des solaren Spektrums durchgeführt werden. Wird der spektrale Transmissionsgrad mit der spektralen solaren Bestrahlungsstärke multipliziert, so erhält man die spektrale Bestrahlungsstärke am Boden. Wird diese über die Wellenlänge integriert, so kann die totale Bestrahlungsstärke am Boden bestimmt werden.

Diese Rechnung wird mit Promt und MYSTIC durchgeführt. Der Vergleich wird dadurch erschwert, dass MYSTIC den gesamten solaren Bereich erfasst und simuliert. Der untersuchte Wellenlängenbereich der Simulation von Promt hingegen wird auf den in Abschnitt 4.1 diskutierten Bereich von  $250 \text{ nm} < \lambda < 3000 \text{ nm}$  beschränkt. Die von Promt simulierte Einstrahlung, siehe Abbildung 4.14, ist im horizontalen Mittel  $142.1 \text{ W/m}^2$ . Die durch MYSTIC simulierte Einstrahlung beträgt im horizontalen Mittel  $137.4 \text{ W/m}^2$ . Die Differenz der Einstrahlung zeigt weiterhin keine Struktur des Wolkenfeldes. Dass Promt trotz kleineren Wellenlängenbereichs eine höhere Einstrahlung simuliert, lässt sich auf die unterschiedlichen Verfahren zur Berechnung der optischen Eigenschaften der Wolken zurückführen,

die in Abschnitt 4.1.3.1 diskutiert wird. Die solar integrierten Profile der Bestrah-



**Abbildung 4.14:** Im Diagramm wird die von Prompt simulierte Bestrahlungsstärke am Boden für den Wellenlängenbereich von 250 bis 3000  $nm$  für das Wolkenfeld der Abbildung 4.10 dargestellt, [eigene Abbildung].

lungsstärken weisen die gleichen Unterschiede auf wie bei der monochromatischen Simulation. Hinzu kommt, dass Prompt in den höheren Atmosphärenschichten aufgrund des kleineren Integrationsbereichs kleinere Strahlungsflüsse simuliert, die jedoch geringe Auswirkungen auf die Einstrahlung am Boden haben.

#### 4.2.1.3 Weitere Simulationsergebnisse

Prompt ist in der Lage, weitere Ergebnisse einer Strahlungstransfer-Simulation zu berechnen: das Profil der Absorptionsrate, die Bestrahlungsstärke am oberen Rand der Modellatmosphäre, die drei-dimensionalen Felder der direkten, der diffus nach unten und der diffus nach oben gerichteten Bestrahlungsstärke sowie eine Abschätzung der Wolkenalbedo. Da keine Vergleichsmöglichkeit vorliegt, kann nur diskutiert werden, ob die erzielten Ergebnisse plausibel sind. Bei den folgenden Simulationen wird eine Atmosphäre mit dem in Abbildung 4.10 dargestellten Wolkenfeld angenommen.

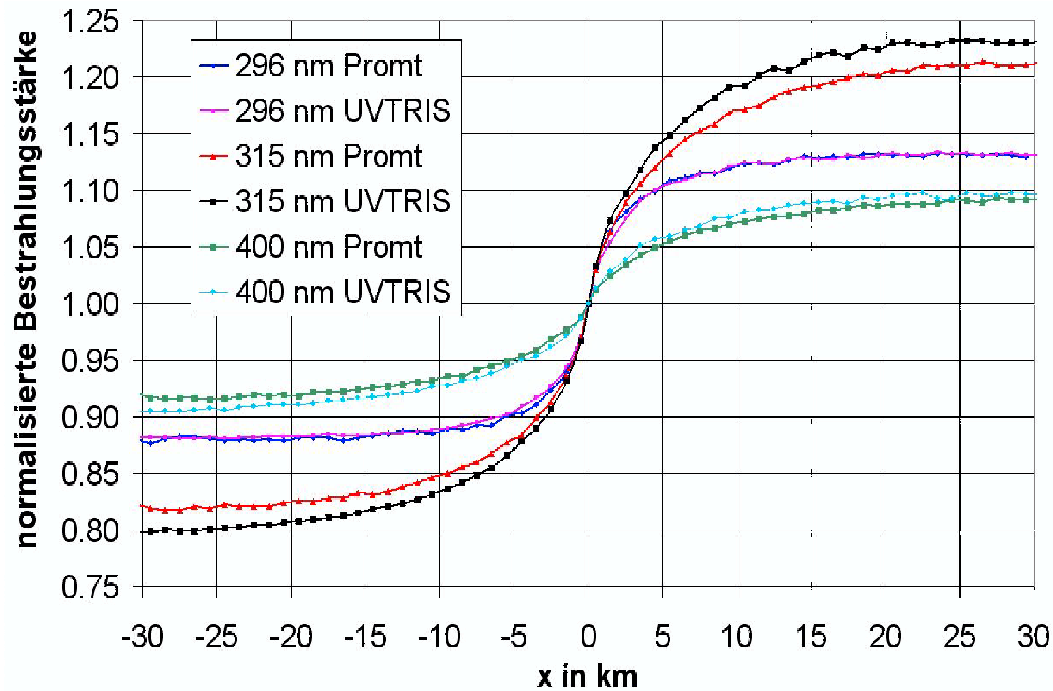
Das Feld der von der Atmosphäre reflektierten Bestrahlungsstärke am Oberrand des Modellgebietes in 120 km Höhe ist sowohl für 550 nm als auch über das solare Spektrum integriert bis auf die statistischen Schwankungen der Monte-Carlo-Methode horizontal homogen. Für 550 nm werden im horizontalen Mittel 78.2 % der Strahlung reflektiert, wobei die horizontal aufgelösten Werte mit einer Standardabweichung von 1.3 % um das horizontale Mittel schwanken. Da die Wolken isotrop streuen, verschwindet das Signal der Wolkenstruktur bei Betrachtung der

Bestrahlungsstärke für große Entfernungen vom Wolkenfeld zunehmend<sup>7</sup>. Die Absorptionsrate zeigt einen plausiblen Verlauf mit einer maximalen Absorptionsrate in einer Höhe von 2.4 km in der LES-Wolkenschicht. Für 550 nm beträgt das Maximum der horizontal gemittelten Absorptionsrate  $2.6 \text{ W}/(\text{m}^2 \text{ nm})$  pro km, das entspricht 0.14 % der spektralen solaren Bestrahlungsstärke. Der Grund hierfür ist der lange optische Weg innerhalb der Wolken und die hohe Strahldichte in dieser Region. Die Wolkenalbedo wird als Quotient von der nach unten gerichteten Bestrahlungsstärke zu der nach oben gerichteten Bestrahlungsstärke, die am oberen Rand des LES-Modellgebietes simuliert werden, berechnet. In Regionen mit hohem Flüssigwassergehalt werden wie erwartet auch hohe Albedowerte simuliert.

### 4.2.2 Inhomogene Albedo

Smolskaia [64] berechnet mit ihrem Modell UVTRIS die Bestrahlungsstärke am Rand einer Eiskante. Die Hälfte des Modellgebietes ihrer Monte-Carlo-Simulation hat eine Albedo von  $A_{\text{Schnee}} = 0.9$ , der Schnee über Eis repräsentiert, die andere Hälfte hat eine Albedo von  $A_{\text{Wasser}} = 0.05$ . In ausreichender Entfernung von der Eiskante stellt sich die in Abschnitt 4.1.4 beschriebene Strahlungsüberhöhung für die jeweilige Albedo des Untergrundes ein. Die Region nahe der Eiskante ist eine Übergangszone zwischen diesen beiden Bereichen. Die Einstrahlung ist hier für das Wasser folglich größer als weit entfernt von der Kante. Die Motivation dieser Rechnung ist die genaue Bestimmung der Strahlungsüberhöhung über dem Wasser, da Phytoplankton empfindlich gegenüber UV-Strahlung ist. Bei der Simulation wird eine wolkenfreie Atmosphäre angenommen und der Sonnenzenitwinkel ist  $60^\circ$ . Es werden neben der Reflektion am Untergrund auch Rayleigh-Streuung und die Absorption durch Ozon berücksichtigt. Abbildung 4.15 zeigt die von UVTRIS und Prompt simulierte spektrale Bestrahlungsstärke in einem Schnitt senkrecht zur Eiskante für verschiedene Wellenlängen. Die Bestrahlungsstärke wird mit dem Wert der Bestrahlungsstärke an der Eiskante normiert dargestellt. Im UV-B-Bereich  $280 \text{ nm} < \lambda < 315 \text{ nm}$  [12] wird ein großer Teil der vom Boden reflektierten Strahlung absorbiert, bevor er nochmals zur Einstrahlung beitragen kann. Der große Gradient des RAF nahe der Eiskante zeigt, dass der Einfluss der schneebedeckten Fläche rasch geringer wird. Für  $\lambda = 315 \text{ nm}$  ist der Unterschied zwischen den Bestrahlungsstärken weit entfernt von der Eiskante am größten, da der RAF für diese Wellenlänge am größten ist. Durch die Normierung mit der an der Eiskante simulierten Bestrahlungsstärke bedingt, erhöht sich der Wert der normierten Bestrahlungsstärke über Schnee und fällt für das Wassergebiet ab. Für  $\lambda > 315 \text{ nm}$  macht sich bemerkbar, dass der Rayleigh-Streuquerschnitt und somit auch der Anteil der zurückgestreuten Photonen geringer wird. Daher ist der RAF wiederum geringer als für  $\lambda = 315 \text{ nm}$ . Da der Absorptionsquerschnitt von Ozon mit größer werdender Wellenlänge bis  $400 \text{ nm}$  rasch abnimmt, ist die Reichweite des Einflusses der schneebedeckten Fläche wesentlich größer als bei kurzen Wellenlängen. Der Gradient des RAFs nahe der Eiskante ist für  $400 \text{ nm}$  am geringsten. Beide Modelle zeigen diese Phänomene in guter Übereinstimmung, wobei die größten Abweichungen für  $\lambda = 315 \text{ nm}$  auftreten. Es ist vorstellbar, dass Prompt die Ab-

<sup>7</sup>Wird hingegen die richtungsabhängige Strahldichte betrachtet, so ist zu erwarten, dass die Struktur des Wolkenfeldes auch weit darüber noch deutlich erkennbar ist. Eine entsprechende Erweiterung von Prompt wird in Abschnitt 5.1 diskutiert.



**Abbildung 4.15:** Im Diagramm wird die von UVTRIS [64] und Promt simulierte Bestrahlungsstärke für ein Modellgebiet aufgetragen, das für  $x < 0$  eine Albedo von  $A_{Wasser} = 0.05$  und für  $x > 0$  eine Albedo von  $A_{Schnee} = 0.9$  hat, wobei  $x$  in km angegeben ist. Die Bestrahlungsstärke wird mit dem Wert an der Eiskante normiert für verschiedene Wellenlängen dargestellt, [eigene Abbildung].

sorption überschätzt, da gemittelte Absorptionskoeffizienten für die Berechnung verwendet werden.

## 4.3 Simulationsgenauigkeit gegenüber Rechenzeit

Die statistische Simulationsgenauigkeit des Monte-Carlo-Verfahrens ist von der Anzahl der simulierten Photonen abhängig [7], jedoch erhöht sich auch die aufzuwendende Rechenzeit mit der Photonenzahl. Daher muss der Benutzer von Promt für jede Simulation die erzielbare Simulationsgenauigkeit gegen die aufzuwendende Rechenzeit abwägen. Im ersten Abschnitt wird der Zusammenhang zwischen Photonenzahl und Rechenzeit erläutert, im zweiten Abschnitt wird die von Promt erzielte Simulationsgenauigkeit in Abhängigkeit von der Photonenzahl betrachtet. Die im Folgenden erwähnten Rechenzeiten, mit Ausnahme des Abschnitts zur Parallelisierung, beziehen sich auf Rechnungen auf einem Pentium III mit 1.23 GHz Takt.

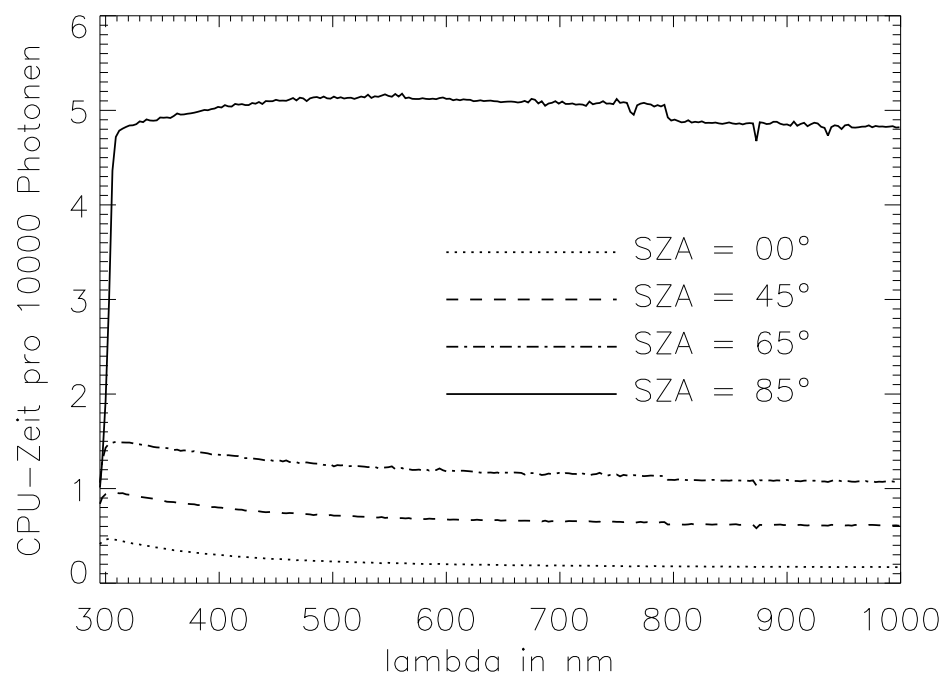
### 4.3.1 Benötigte Rechenzeit

Die von Promt benötigte Arbeitszeit verteilt sich auf mehrere Arbeitsschritte: Einlesen der Parameter und Datenbanken, Berechnung der optischen Eigenschaften, Simulation des Photonenfluges, Berechnung und Ausgabe des Ergebnisses. Es gibt zwei Schritte, die wesentlich mehr Rechenzeit benötigen als alle anderen. Dies ist zum einen die Berechnung der gemittelten Absorptionskoeffizienten. Beispielsweise dauert die Berechnung von über 1 nm gemittelten Absorptionskoeffizienten

für Wellenlängen von 290 bis 3000 nm mit der Routine `lilibroad` ca. 70 Stunden. Da die Absorptionskoeffizienten abgespeichert werden, muss diese Rechenzeit nur bei der ersten Simulation mit der verwendeten Hintergrundatmosphäre und dem gewählten Mittelungsintervall des Absorptionskoeffizienten aufgewendet werden. Der zweite rechenzeitintensive Simulationsschritt ist die Monte-Carlo-Simulation des Photonenfluges. Sie beansprucht, abgesehen von der Berechnung der Absorptionskoeffizienten, etwa 99 % der Rechenzeit.

Die benötigte Rechenzeit pro Photon ist von mehreren Faktoren abhängig. Sie hängt im wesentlichen von der durchschnittlichen Flugstrecke der Photonen ab oder, präziser ausgedrückt, von der Anzahl der Boxen, die durchflogen werden, siehe Abschnitt 3.1.3, und von der Anzahl der zu simulierenden Streuprozesse.

Die Rechenzeit nimmt für größer werdende Sonnenzenitwinkel zu, da die Photonen auf geneigtem und somit längerem Weg die Atmosphäre passieren. In Abhängigkeit von der horizontalen Auflösung muss der Übergang des Photons in die horizontal benachbarte Box häufiger simuliert werden. Abbildung 4.16 zeigt die von Promt benötigte durchschnittliche Rechenzeit für 10000 Photonen in Abhängigkeit von der Wellenlänge und dem Sonnenzenitwinkel für einen horizontale Gitterpunktstand von 1000 m. Bei diesen Simulationen werden eine wolkenfreie Atmosphäre und ein total absorbierender Untergrund angenommen. 10000 Photonen können von Promt in etwa 0.2 s simuliert werden, wenn die Sonne im Zenit steht. Für einen Sonnenzenitwinkel von  $85^\circ$  wird nahezu 25 mal so viel Rechenzeit benötigt, und die Simulation von 10000 Photonen nimmt ca. 4.9 s in Anspruch. Weiterhin



**Abbildung 4.16:** Das Diagramm zeigt die von Promt benötigte Rechenzeit zur Simulation des Fluges von 10000 Photonen in Abhängigkeit der Wellenlänge und des Sonnenzenitwinkels (SZA englisch *solar zenith angle*), [eigene Abbildung].

lässt sich in der gleichen Abbildung die Abhängigkeit der Simulation von der Wellenlänge studieren. Für kurze Wellenlängen ist die Wahrscheinlichkeit einer Rayleigh-Streuung groß. Die mittlere Flugstrecke wird durch eine Streuung länger im Vergleich zum direkten Weg durch die Atmosphäre, die Rechenzeit nimmt zu.

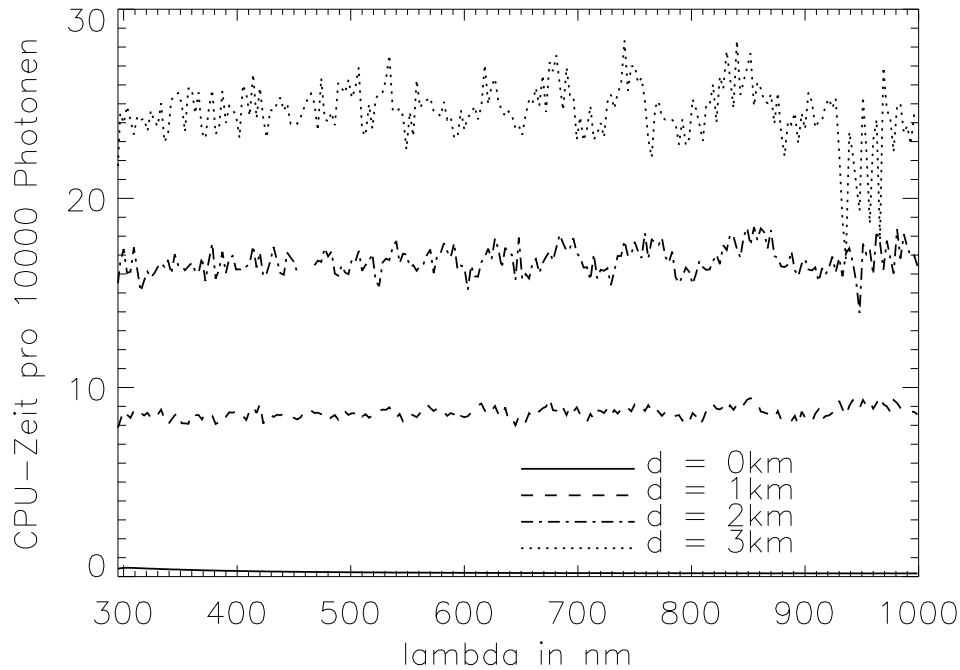
Eine Ausnahme bilden sehr große Sonnenzenitwinkel. Für diese wird ein großer Teil der Photonen schnell wieder aus dem Modellgebiet gestreut, wodurch die Simulationszeit für kurze Wellenlängen geringer ist im Vergleich zu längeren Wellenlängen. Für Wellenlängen kleiner als 320 nm werden Photonen stark durch Ozon absorbiert. Wenn ein Photon absorbiert ist, muss die Berechnung des Photonenfluges nicht fortgesetzt werden, bis dieses auf den Boden trifft oder ins Weltall entweicht. Daher nimmt die aufzuwendende Rechenzeit ab, wenn die Absorption zunimmt. Für horizontal homogene Simulationen kann die Berechnung der  $x$ - und  $y$ -Position des Photons zu Gunsten der Rechenzeit übersprungen werden, indem die Option `only_z` gleich `.TRUE.` gesetzt wird. Somit können für diese Spezialfälle Simulationen für größere Sonnenzenitwinkel mit der gleichen Geschwindigkeit wie für  $\text{SZA} = 0^\circ$  durchgeführt werden.

Ein weiterer entscheidender Einflussfaktor auf die Rechenzeit ist die Bewölkung. Fliegt ein Photon in eine Wolke, kommt es häufig zur Streuung. Im sichtbaren Bereich ist die Wolke nicht absorbierend, daher kann sich die Flugstrecke der Photonen durch Mehrfach-Streuung wesentlich verlängern. Die Simulation der Streuprozesse und die verlängerte Flugstrecke erhöhen die pro Photon benötigte Rechenzeit. Im Infraroten hingegen werden die Photonen durch das Wolkenwasser absorbiert. Die Simulation des Photonenfluges kann dadurch eher enden. Die Abhängigkeit der benötigten Rechenzeit von Bewölkung wird in Abbildung 4.17 dargestellt. Die Wolken haben einen Flüssigwassergehalt von  $1 \text{ g/m}^3$  und es wird ein Tropfenradius von  $10 \mu\text{m}$  angenommen, somit haben die Wolken einen vertikal integrierten Flüssigwassergehalt von  $1 \text{ kg/m}^2$ ,  $2 \text{ kg/m}^2$  und  $3 \text{ kg/m}^2$ . Die Sonne steht bei diesen Simulationen im Zenit und der Untergrund ist vollständig absorbierend. Für 10 000 Photonen werden durchschnittlich 8.9 s für das Wolkenfeld mit  $1 \text{ kg/m}^2$ , 17.1 s für  $2 \text{ kg/m}^2$  und 24.2 s für  $3 \text{ kg/m}^2$  benötigt.

Ein weiterer Einflussfaktor auf die Rechenzeit ist der Untergrund. Für einen vollständig absorbierenden Untergrund kann die Simulation des Photonenfluges abgebrochen werden, sobald das Photon auf den Boden trifft. Hat der Untergrund jedoch eine Albedo ungleich Null, so wird das Photon mit einem geringeren Gewicht reflektiert, und die Simulation muss fortgesetzt werden. Die Erhöhung des Rechenzeitbedarfs ist nahezu unabhängig vom exakten Wert der Albedo, solange sie ungleich Null ist, da die meisten Photonen so lange simuliert werden, bis sie das Modellgebiet nach oben verlassen. Nur in Regionen starker Absorption ist eine leichte Abhängigkeit der Rechenzeit von dem Wert der Albedo zu sehen. Ist die Albedo ungleich Null, so werden 10 000 Photonen in etwa 12.5 s simuliert, wenn die Sonne im Zenit steht und der Boden vollständig absorbierend ist. Der Bedarf an Rechenzeit ist somit etwa 6 mal höher als für einen total absorbierenden Untergrund.

### 4.3.2 Simulationsgenauigkeit

Das Ergebnis einer Monte-Carlo-Simulation ist von der Anzahl der verwendeten Photonen abhängig. Die statistische Unsicherheit des Monte-Carlo-Verfahrens wird von Cahalan et al. [7] untersucht. Er zeigt, dass die zu erwartende Standardabweichung des Ergebnisses  $\sigma$  proportional zum Kehrwert der Wurzel der zur Bestim-



**Abbildung 4.17:** Das Diagramm zeigt die von Prompt benötigte Rechenzeit zur Simulation des Fluges von 10 000 Photonen in Abhängigkeit der Wellenlänge und der Dicke  $d$  einer Wolkenschicht mit einem Flüssigwassergehalt von  $1 \text{ g/m}^3$ , [eigene Abbildung].

mung dieser Größe registrierten Photonenanzahl  $n$  ist.

$$\sigma \sim \frac{1}{\sqrt{n}} \quad (4.2)$$

Aus dieser Beziehung leitet sich direkt ein statistisches Verfahren nach Varnai [8] ab, das im Folgenden angewandt wird, um die Simulationsgenauigkeit der Bestrahlungsstärke zu ermitteln. Die Gesamtanzahl der verwendeten Photonen wird in  $N_{teil}$  gleich große Anteile aufgeteilt, für die jeweils eine separate Strahlungstransfer-Simulation durchgeführt wird, deren Ergebnisse  $N_{teil}$  Realisierungen eines stochastischen Prozesses sind, deren Standardabweichung bestimmt werden kann. Die Photonenanzahl der Einzelsimulationen kann auch addiert und somit zu einer Gesamtrechnung zusammengefasst werden. Die Standardabweichung des Ergebnisses der Gesamtsimulation  $\sigma_{ges}$  lässt sich aus der Standardabweichung der Ergebnisse der Einzelsimulationen  $\sigma_{teil}$  ermitteln.

$$\sigma_{ges} = \frac{\sigma_{teil}}{\sqrt{N_{teil}}} \quad (4.3)$$

Mit Prompt werden jeweils 100 Simulationen des solaren Strahlungstransfers mit identischem Modellgebiet durchgeführt, bei denen jedoch unterschiedliche Zufallszahlen verwendet werden. Es wird eine im Zenit stehende Sonne und ein vollständig absorbierender Untergrund angenommen. Weiterhin werden Rayleigh-Streuung, Absorption und Wolken bei den Simulationen berücksichtigt. In Tabelle 4.4 werden Mittelwerte und die nach Gleichung (4.3) bestimmten Standardabweichungen der von Prompt simulierten Bestrahlungsstärke für einen wolkenlosen, in Tabelle 4.5 für einen mit einer 1 km dicken homogenen Wolkenschicht bedeckten Himmel angegeben. Die Wolkenschicht hat einen Flüssigwassergehalt von  $1 \text{ g/m}^3$ . Das solare



Photonenzahl	$\overline{F}$ in $W/m^2$	$\overline{\sigma_F}$ in $W/m^2$
1	1061.36	12.23
5	1063.11	8.99
10	1062.40	5.26
50	1062.69	1.94
100	1062.74	1.25

**Tabelle 4.4:** Die Tabelle zeigt die Mittelwerte und Standardabweichung der von 250 bis 2500 nm integrierten Bestrahlungsstärke für einen wolkenlosen Himmel an. Die Simulation wird mit einer Auflösung von einem nm durchgeführt. Die Photonenzahl gibt die pro Wellenlängeintervall verwendeten Photonen an.

Photonenzahl	$\overline{F}$ in $W/m^2$	$\overline{\sigma_F}$ in $W/m^2$
1	75.81	10.45
3	75.67	5.55
10	76.35	3.10
33	75.94	1.69
100	76.23	0.98

**Tabelle 4.5:** Die Tabelle zeigt die Mittelwerte und Standardabweichung der von 250 bis 2500 nm integrierten Bestrahlungsstärke für einen bewölkten Himmel mit einer 1 km dicken homogenen Wolkenschicht an. Die Simulation wird mit einer Auflösung von einem nm durchgeführt. Die Photonenzahl gibt die pro Wellenlängeintervall verwendeten Photonen an.

Spektrum wird hierfür von 250 bis 2500 nm in 1-nm-Schritten simuliert, wobei für jeden Wellenlängenschritt so viele Photonen simuliert werden, wie in der linken Spalte der Tabellen angegeben ist. Die Standardabweichung wird, Gleichung (4.3) entsprechend, mit höherer Photonenzahl kleiner. Für einen Faktor von 100 bei der Photonenanzahl wird die Simulationsgenauigkeit wie erwartet um den Faktor 10 verbessert. Prompt bestimmt die Bestrahlungsstärke in Abhängigkeit von der horizontalen Position, die mit der Auflösung  $dx$  in  $x$ -Richtung und  $dy$  in  $y$ -Richtung dargestellt wird. Da die Simulationsgenauigkeit der Bestrahlungsstärke der Fläche  $dx dy$  von der Anzahl der zur der Bestimmung dieser Größe beitragenden Photonen abhängt, bezieht sich die in der *control*-Datei angegebene Photonenzahl *photons* auf diese Grundfläche. So können die Gitterpunktanzahl und der Gitterpunkt Abstand verändert werden, ohne dass sich die zu erwartende Simulationsgenauigkeit ändert.

Die Anzahl der Photonen, die zur Simulation eines Wellenlängenintervalls verwendet werden, ergibt sich somit durch Multiplikation der in der *control*-Datei angegebenen Photonenanzahl mit der Anzahl der Gitterzellen  $nx \cdot ny$ . Wird diese Zahl weiterhin mit der in der Simulation verwendeten Anzahl von Wellenlängenintervallen  $n_\lambda$  multipliziert, so ergibt sich die Gesamtzahl  $n_{gesamt}$  der zu simulierenden Photonen:

$$n_{gesamt} = photons \cdot nx \cdot ny \cdot n_\lambda. \quad (4.4)$$

### 4.3.3 Beispiel einer Rechenzeitabschätzung

Für die Simulation des drei-dimensionalen Wolkenfeldes in Abschnitt 4.2.1 werden 20 Photonen pro Wellenlängenintervall und pro horizontaler Gitterbox verwendet, um die Simulationsunsicherheit auf unter  $5 \text{ W/m}^2$  zu begrenzen. In einer Teilrechnung werden 1067 Wellenlängenintervalle à 1 nm von 290 nm bis 1357 nm simuliert. Die Anzahl der horizontalen Gitterpunkte ist  $n_x = 96$  in  $x$ - und  $n_y = 96$  in  $y$ -Richtung. Nach Gleichung (4.4) ist die Gesamtzahl der simulierten Photonen 197 Millionen. Die Sonne steht im Zenit, der Untergrund ist vollständig absorbierend, daher wird die Rechenzeit hauptsächlich durch das Wolkenfeld bestimmt. Der durchschnittliche vertikal integrierte Flüssigwassergehalt liegt im horizontalen Mittel bei  $0.76 \text{ kg/m}^2$ . Das ist etwas weniger Flüssigwasser als die 1 km dicke Wolkenschicht in Abbildung 4.17 hat, bei der ca. 8.5 s Rechenzeit für 10 000 Photonen benötigt werden. Für das LES-Wolkenfeld ist somit ein etwas geringerer Rechenzeitbedarf aufgrund des geringeren Flüssigwassergehalts zu erwarten. Die aufzuwendende Rechenzeit wird daher auf etwas weniger als

$$197 \cdot 10^6 \text{ Photonen} \cdot 8.5 \text{ s} / 10000 \text{ Photonen} = 167450 \text{ s} \quad (4.5)$$

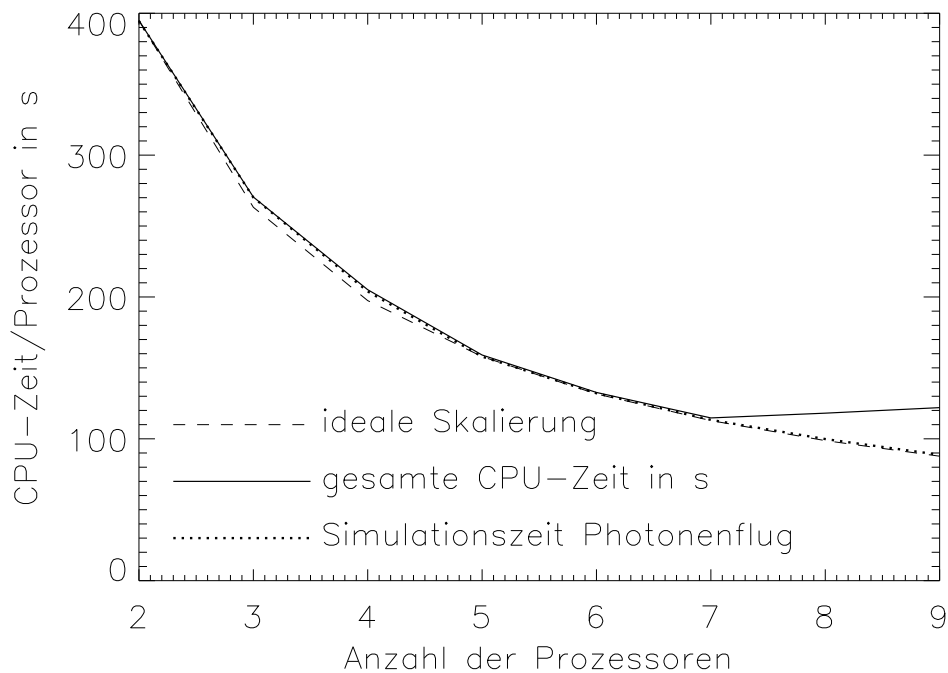
geschätzt. Die gemessene Rechenzeit dieser Simulation beträgt  $149500 \text{ s} = 1 \text{ Tag } 18 \text{ Stunden}$ , somit konnten 10 000 Photonen durchschnittlich in 7.6 s simuliert werden. Dieses Ergebnis ist in guter Übereinstimmung mit der a-priori-Abschätzung. Von der benötigten Rechenzeit werden 99.9 % durch die Simulation des Photonenfluges beansprucht.

### 4.3.4 Parallelisierung

Da das Monte-Carlo-Verfahren rechenzeitintensiv ist, wird Prompt parallelisiert. Die Performance von Prompt wird auf einem Rechner namens HANNI des Norddeutschen Verbunds für Hoch- und Höchstleistungsrechnern bestimmt. HANNI ist Teil eines Computersystems, das aus 32 Rechnern der Art IBM pSeries 690 besteht. In jedem Rechner befinden sich 4 MultiChip Module (MCM) mit je 4 Doppelprozessoren vom Typ Power 4, 1.3 GHz. Insgesamt sind 1024 Prozessoren mit einer (peak) Rechenleistung von ca. 5.3 TeraFlop/s verfügbar [22]. Bei der Parallelisierung von Prompt werden die zu simulierenden Photonen gleichmäßig auf die Prozessoren verteilt, siehe Abschnitt 3.6. Im Idealfall würde die benötigte Rechenzeit auf alle Prozessoren verteilt werden, so dass bei der Verwendung von  $n$  Prozessoren nur noch  $1/n$  der Rechenzeit benötigt wird. Die Verringerung der benötigten Rechenzeit wird als Skalierbarkeit des Programms bezeichnet, die Verringerung auf  $1/n$  der Rechenzeit als ideale Skalierung.

Abbildung 4.18 zeigt die benötigte Rechenzeit von Prompt bei der Verwendung mehrerer Prozessoren. Für 2 bis 7 Prozessoren entspricht die Abnahme der Rechenzeit pro Prozessor nahezu einer idealen Skalierung. Dies ist möglich, da während der Simulation des Photonenfluges keine Informationen zwischen den Prozessoren ausgetauscht werden müssen. Lediglich am Ende der Simulation müssen die Photonenzahlen zur Auswertung zusammengefasst werden. Die Methode der Parallelisierung von Prompt sorgt für eine möglichst gleichmäßige Belastung der Prozessoren, siehe Abschnitt 3.6.

Die Gesamtrechenzeit und die Rechenzeit, die zur Simulation des Photonenfluges



**Abbildung 4.18:** Das Diagramm zeigt die vom parallelisierten Prompt benötigte Rechenzeit zur Simulation von 22.5 Millionen Photonen bei wolkenlosem Himmel und vollständig absorbierendem Untergrund in Abhängigkeit von der Anzahl der verwendeten Prozessoren. Im Diagramm wird unterschieden zwischen Gesamtrechenzeit (durchgezogene Linie) und Rechenzeit zur Simulation des Photonenfluges (gepunktete Linie). Die gestrichelte Linie zeigt die ideale Abnahme der Rechenzeit, [eigene Abbildung].

benötigt werden, ist nahezu identisch. Daher wird in Prompt nur der Photonenflug parallel gerechnet. Ist die verwendete Prozessorenzahl größer als 7, so nimmt die für den Photonenflug benötigte Rechenzeit weiterhin nach dem idealen Verlauf ab. Die Gesamtrechenzeit hingegen steigt wieder an. Der Grund hierfür ist bisher unbekannt. Die Kommunikation zwischen den 32 Prozessoren eines Knotens ist schneller als die Kommunikation zwischen verschiedenen Knoten. Daher ist ein aufgrund der Rechnerarchitektur erhöhter Rechenzeitbedarf erst ab einer Prozessoranzahl von 33 Prozessoren zu erwarten.

# Kapitel 5

## Weiterentwicklung von Promt

In diesem Kapitel werden mögliche Verbesserungen von Promt im ersten Abschnitt, Erweiterungen im zweiten Abschnitt, Validierungen im dritten sowie Optimierungen bezüglich der Rechenzeit im letzten Abschnitt beschrieben.

### 5.1 Verbesserung der Modellphysik

In Kapitel 4 wird demonstriert, dass Promt die grundlegenden physikalischen Prozesse des Strahlungstransfers simulieren kann. Die hier vorgeschlagenen Verbesserungen erhöhen die Qualität der Simulation oder ermöglichen dem Nutzer von Promt eine bequemere oder flexiblere Gestaltung des zu simulierenden Szenarios.

- **Hintergrundatmosphäre**

Für viele Anwendungen von Promt wäre es nützlich, noch weitere Möglichkeiten zur Festlegung der Modellatmosphäre zur Verfügung zu haben. So könnte Promt mit Radiosonden gemessene Temperatur- und Feuchtigkeitsprofile bei der Strahlungstransfer-Simulation verwenden, um die Vergleichbarkeit mit Messungen zu erhöhen. Die Konzentration von Spurengasen könnte variabel gestaltet werden, so dass beispielsweise Szenarien mit erhöhter Konzentration von  $CO_2$  simuliert oder die Dicke der Ozonschicht an reale Verhältnisse mithilfe einer Ozonklimatologie [60] angepasst werden könnten. Im Kombination mit LES-Modellen wäre es möglich, die vom LES-Modell berechnete Wasserdampf- und Temperaturverteilung in der Berechnung der Absorptionskoeffizienten zu berücksichtigen.

Die planparallele Darstellung der Atmosphäre wird für größer werdende Sonnenzenitwinkel immer ungenauer. Damit auch niedrige Sonnenstände von Promt exakt simuliert werden können, muss die Krümmung der Erdoberfläche bei der Monte-Carlo-Simulation berücksichtigt werden.

- **Extraterrestrisches Spektrum**

Statt des Sonnenzenitwinkels könnte die geographische Position, das Datum und die Uhrzeit des zu simulierenden Szenarios in der *control*-Datei angegeben werden, da sich der Sonnenzenitwinkel aus den anderen Größen berechnen lässt, z. B. [34]. Meist sind die anderen Größen auch einfacher zu bestimmen als der Sonnenzenitwinkel. Mithilfe der Zeitangaben könnte auch das solare Spektrum bezüglich des veränderlichen Abstandes zwischen Erde und Sonne korrigiert werden.

- **Rayleigh-Streuung**

Wie Abschnitt 2.2.1 beschreibt, ist die Berücksichtigung des Anisotropiefaktors

für die genaue Berechnung des Rayleigh-Streuquerschnittes von entscheidender Bedeutung. Lenoble [32] schreibt, dass auch die Phasenfunktion von dem Anisotropiefaktor  $\delta$  abhängig ist.

$$P(\theta) = \frac{3}{2} \frac{1}{2 + \delta} [(1 - \delta) \cos^2 \theta + (1 + \delta)] \quad (5.1)$$

Prompt könnte den wellenlängenabhängigen Anisotropiefaktor beispielsweise nach Bates [3] bei der Berechnung einer von ihm abhängigen Phasenfunktion verwenden.

- **Absorption**

Die in Prompt verwendeten Routinen von Scheirer [55] nutzen die Absorptionslinien-Datenbank HITRAN 1996. Seit der Entwicklung der Routinen wurden neuere Versionen der HITRAN Datenbank herausgegeben. Die zur Zeit aktuellste Version ist von 2004. Durch Benutzung der neuesten HITRAN Datenbank-Version könnten genauere Informationen zur Berechnung des Absorptionskoeffizienten verwendet werden. Ein weiterer Vorteil wäre, dass die von Scheirer entwickelten Routinen zur Berechnung der gesamten Absorption aller Gase inklusive Ozon durchgeführt werden könnten, da auch Informationen über die Absorptionslinien von Ozon im ultravioletten und sichtbaren Bereich in dieser HITRAN-Version verfügbar sind. Insbesondere wird eine Verbesserung für das Mittelungsverfahren des Absorptionskoeffizienten erwartet, da der effektiv gemittelte Absorptionskoeffizient von der Konzentration der einzelnen Gase und von dem Zusammenwirken der einzelnen Absorptionsbeiträge abhängig ist.

Für die Simulation des Strahlungstransfers im UV-Bereich ist es wünschenswert, auch die Absorption durch  $NO_2$  berücksichtigen zu können. Rechnungen mit *lib-Radtran* und LOWTRAN haben gezeigt, dass die durch  $NO_2$  verursachte Abnahme der Erythem-wirksamen Bestrahlungsstärke in der gleichen Größenordnung liegt wie die in Abschnitt 4.1.2.3 beobachteten Differenzen zwischen den Modellen. Das Profil der  $NO_2$ -Konzentration ist in den Modellatmosphären von Prompt bereits vorhanden.

- **Wolken**

Prompt berechnet die Phasenfunktion der Wolkentropfen mit einer Auflösung von  $\Delta \theta = 1^\circ$ . Wie in Abschnitt 3.3.2 beschrieben, wird beim Monte-Carlo-Verfahren aus der Phasenfunktion die kumulative Phasenfunktion berechnet. Prompt verwendet dazu das zentrierte Eulerschrittverfahren. Nach der theoretische Herleitung ist  $P_{cum}(\theta = 180^\circ) = 1$ . Bei der numerischen Integration treten jedoch Integrationsfehler für große Größenparameter  $x$ , siehe Abschnitt 2.3, auf, da sich der Funktionswert der Phasenfunktion nahe  $\theta = 0^\circ$  innerhalb weniger Grad um mehrere Größenordnungen ändert. Momentan wird dieses Problem gelöst, indem ein Offset von der Phasenfunktion abgezogen wird, um  $P_{cum}(\theta = 180^\circ) = 1$  zu erfüllen. Hiermit wird der Integrationsfehler vollständig dem ersten Integrationsschritt von  $0^\circ$  bis  $1^\circ$  zugeordnet. Eine elegantere Möglichkeit, dieses Problem zu beheben, ist es, die Auflösung der Phasenfunktion bei Bedarf feiner zu wählen oder der Änderung der Phasenfunktion anzupassen und so den Integrationsfehler zu reduzieren.

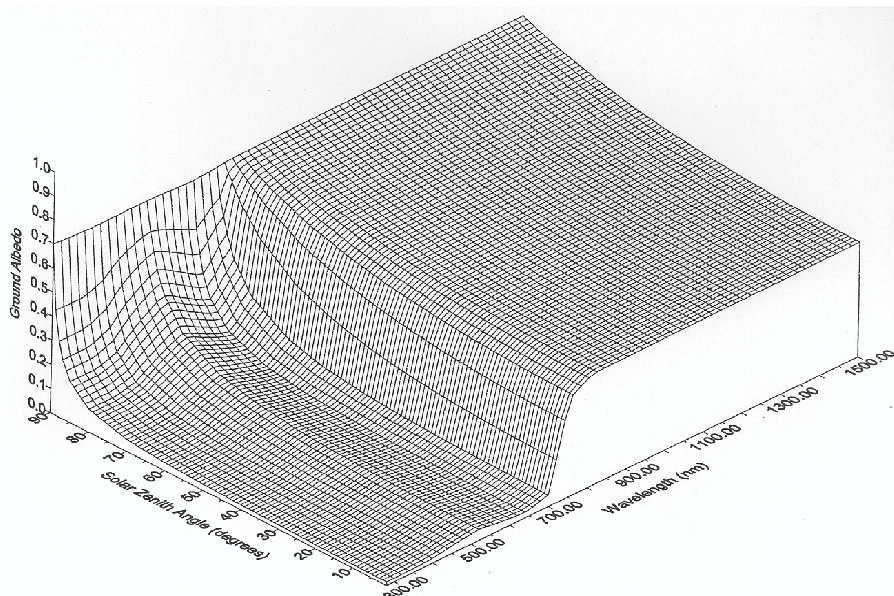
Weiterhin nimmt Prompt einen konstanten Tropfenradius im gesamten Wolkengebiet an und berechnet danach die Tröpfchenanzahl. Der Flüssigwassergehalt einer Wolke verteilt sich jedoch auf Tropfen verschiedener Größe, wobei das Spektrum des Tropfenradius zusätzlich auch räumlich variabel sein kann. Um dies zu berücksichtigen, müsste das Spektrum der Tropfengröße vorgegeben oder empirisch aus

dem Flüssigwassergehalt der Wolken ermittelt werden. Die in Promt vorhandene Mie-Routine könnte zur Berechnung von über das Tropfenspektrum gemittelten optischen Eigenschaften verwendet werden. Alternativ könnte auch eine Parametrisierung z. B. nach [24] der optischen Eigenschaften eingebaut werden.

Um Eiswolken und Wolken mit gemischter Phase bei der Simulation des Strahlungstransfers berücksichtigen zu können, müssen deren optischen Eigenschaften berechnet werden. Die Berechnung ist kompliziert, da Eiskristalle verschiedene Formen haben und auch ihre räumliche Ausrichtung bekannt sein muss. In Promt könnten beispielsweise die Parametrisierungen nach Yang [73] und Key [27] oder nach Fu [16], [17] verwendet werden.

- **Albedo**

Die Reflektionseigenschaften des Untergrunds sind abhängig von der Wellenlänge und dem Einfallswinkel der Strahlung, siehe Abbildung 5.1. Promt könnte so ausgebaut werden, dass es auf eine Datenbank zugreift, in der die Abhängigkeit der Albedo von der Wellenlänge und die bidirektionale Reflektionsfunktionen für eine Anzahl von vorgefertigten Untergrundtypen wie Sand, Wald, Wiese, Stadt, Schnee oder Wasser gespeichert sind. Weiterhin sollte jedoch auch die Möglichkeit vorgesehen sein, selbst Bodentypen zu definieren.



**Abbildung 5.1:** Das Diagramm zeigt die Albedo von Gras in Abhängigkeit der Wellenlänge und dem Sonnenzenitwinkel, [4].

## 5.2 Erweiterungen der Modellphysik

Mit den hier beschriebenen Erweiterungen wird es möglich, die Topographie des Untergrunds, die Raman-Streuung und Aerosole bei der Strahlungstransfer-Simulation zu berücksichtigen und als Ergebnis der Simulation weitere Strahlungsgrößen zu berechnen.

- **Topographie**

Das Monte-Carlo-Verfahren ermöglicht auch die Berücksichtigung der Topographie des Untergrundes. Hierzu müsste für jeden Gitterpunkt des Untergrundes die Höhe

bekannt sein. Die Oberfläche in den Zwischenräumen könnte beispielsweise durch bilineare Interpolation ergänzt werden. Kommt ein Photon in die Nähe des Bodens, muss ermittelt werden, an welcher Stelle das Photon auf den Boden auftrifft und welche Neigung der Boden an dieser Stelle hat. (Wird eine bidirektionale Reflektionsfunktion berücksichtigt, so muss auch der Winkel der Flugrichtung gegenüber dem geneigten Boden bestimmt werden.) Eine elegante Möglichkeit, den Reflektionsprozess am Boden simulieren, ist, den geneigten Boden durch Drehung auf ein System mit ebenem Boden zu überführen, die Reflektion in diesem zu simulieren, und anschließend das System in seine ursprüngliche Lage zurück zu drehen.

- **Erweiterte Physik des Streu-Prozesses**

In einigen Anwendungsfällen der Fernerkundung wird die unelastische Raman-Streuung ausgenutzt. Es handelt sich hierbei um einen Streuprozess, bei dem sich die Wellenlänge des Photons verändert. Da dieser Prozess mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit eintritt, lässt er sich gut in die Monte-Carlo-Simulation einbeziehen. Prompt berücksichtigt bei der Modellierung des Strahlungstransfers keine Polarisierung. Hierdurch können Simulationsfehler bis zur Größe von 5 bis 10% auftreten [33]. Es ist möglich, den Streuprozess für polarisierte Strahlung mithilfe der Stokes-Parameter zu beschreiben [34].

- **Aerosole**

Aerosole beeinflussen durch Absorption und Streuung den Strahlungstransfer. Insbesondere wird im UV-Bereich die Strahlung verstärkt gestreut. Hingegen wird die Globalstrahlung in wesentlich geringerem Maß beeinflusst, [58]. Zur Berücksichtigung von Aerosolen im Prompt muss neben der Konzentration auch die Zusammensetzung und Größenverteilung der Aerosole bekannt sein. Diese Informationen könnten auch für beispielsweise ländliche, urbane, maritime und polare Umgebungen vorgefertigt werden.

- **Erweiterung der Modellausgabe**

1. *Strahldichte*

Die Strahldichte kann simuliert werden, indem die Flugrichtung der Photonen während der Monte-Carlo-Simulation des Photonenfluges registriert wird. Dazu muss der Raumwinkel in Sektoren eingeteilt werden, für die die Photonenzahl bestimmt wird, die aus dieser Richtung gekommen sind [29].

Das Institut für Meteorologie und Klimatologie führte Strahldichte-Messungen in der Antarktis durch [72], welche zur Validierung einer Strahldichte-Simulation von Prompt genutzt werden könnten. Die Messungen wurden schon für wolkenlose Situationen mit Simulationen von *libRadtran* verglichen, insbesondere wurde die Strahlungsüberhöhung nahe dem Horizont untersucht.

2. *Abschätzung der statistischen Simulationsgenauigkeit*

Mit dem in Abschnitt 4.3.2 beschriebenen Verfahren die statistische Simulationsgenauigkeit des Monte-Carlo-Verfahrens für die einzelnen Gitterfelder bestimmt werden. Da hierzu die Photonenanzahl in mehrere gleich große Anteile aufgeteilt werden muss, lässt sich diese Erweiterung hervorragend durch die Parallelisierung des Programms bewerkstelligen, da dabei die Photonenanzahl schon gleichmäßig auf die Prozessoren verteilt wird. Es ist also nur noch notwendig, die Standard-Abweichung der Ergebnisse der einzelnen Prozessoren zu bestimmen.

3. *Biologische Wirkungsfunktionen*

Prompt ermöglicht es, die Bestrahlungsstärke mit der CIE-Funktion nach Gleichung (3.28) gewichtet zu integrieren. Für biologische Anwendungen sind noch zahlrei-

che weitere Wirkungsfunktionen denkbar. UV-Strahlung kann Schäden am Erbgut von Zellen [62] oder an den Augen verursachen, das Wachstum von Phytoplakton sinkt unter UV-Belastung [11], [23]. Fischbestände [63] und Pflanzen [10] reagieren empfindlich. Im sichtbaren Bereich ist die Photosyntheseleistung von Pflanzen und die spektrale Empfindlichkeit des menschlichen Auges von Interesse.

### 5.3 Validierung von Promt

Für alle von Promt erfassten Prozesse wäre eine Validierung gegenüber Messungen sehr interessant und auch notwendig. Abweichungen zwischen modellierten und gemessenen Werten können Aufschluss über Ungenauigkeiten der Simulation oder des Messsystems geben. Insbesondere kann überprüft werden, ob die in Promt verwendeten Simulationsverfahren die komplexe Realität in ausreichendem Maße erfassen kann oder ob komplexere Verfahren verwendet werden müssen. Das Institut für Meteorologie und Klimatologie der Universität Hannover verfügt über geeignete Messinstrumente um eine solche Validierung durchzuführen.

Auch aus dem Vergleich mit anderen Modellen können Erkenntnisse über die Simulationsgenauigkeit von Promt gewonnen werden. Hierzu würden sich die im I3RC-Vergleich [8] gerechneten Szenarien anbieten.

### 5.4 Modelloptimierung

In diesem Abschnitt wird ein Überblick über mögliche Optimierungen von Promt gegeben. Diese haben vor allem die Beschleunigung der Berechnung zum Ziel. Die Optimierungen konzentrieren sich vor allem auf die Simulation des Photonenflusses, da dieser Programmteil mit Abstand am meisten Rechenzeit benötigt.

Als erstes wird beschrieben, wie die Photonenanzahl optimal ausgewählt wird. Anschließend wird in den Abschnitten diskutiert, wie die einzelnen Schritte der Monte-Carlo-Simulation optimiert werden können.

Bei der Simulation des Streuprozesses kann die Berechnung des Streuwinkels und die in Abschnitt 3.1.3.4 beschriebene Drehung des Koordinatensystems optimiert werden. Für die Absorption werden zwei Möglichkeiten der Optimierung geschildert. Die erste optimiert das in Promt vorhandene Verfahren. Als zweites wird das *correlated-k*-Verfahren [26] zur Optimierung der Absorptionsberechnung vorgeschlagen. Hiermit kann die totale Bestrahlungsstärke sehr effizient und exakt bestimmt werden. Der Nachteil des Verfahrens ist, dass die spektrale Information des Ergebnisses verloren geht.

#### 5.4.1 Photonenzahl

Die Simulationsunsicherheit der solar integrierten Bestrahlungsstärke wird minimiert, wenn die Unsicherheit der spektralen Bestrahlungsstärke gleichmäßig auf alle Wellenlängen verteilt ist. In spektralen Bereichen, die wenig zur Bestrahlungsstärke beitragen, ist es möglich die zu simulierende Photonenanzahl niedrig zu wählen. Bereiche, in denen die Atmosphäre ganz undurchlässig ist, brauchen überhaupt nicht simuliert zu werden. Stattdessen kann eine höhere Anzahl an Photonen in Bereichen verwendet werden, die viel zur Bestrahlungsstärke beitragen. Ein erster Ansatz zur flexiblen Handhabung der Photonenanzahl wäre es,



die Anzahl nach der solaren spektralen Bestrahlungsstärke zu skalieren. Eine weiterführende Methode wäre es, einen kleinen Vorlauf des Monte-Carlo-Modells zu starten, mithilfe dessen der Beitrag verschiedener Wellenlängen zum integrierten Ergebnis abgeschätzt werden kann.

### 5.4.2 Streuung

Zur Simulation eines Streuprozesses muss zum einen die neue Richtung des Photons in einem mit dem Photon mitgeführten System bestimmt werden. Mögliche Optimierungen hierfür werden im ersten Abschnitt beschrieben. Zum anderen muss das mitgeführte System durch Drehung in das feste Modellsystem überführt werden. Eine Optimierung dieses Prozesses wird im zweiten Abschnitt beschrieben.

#### 5.4.2.1 Bestimmung der Streurichtung

Die Verwendung der kumulativen Phasenfunktion kann durch eine effizientere, direkte Berechnung des Streuwinkels ersetzt werden. Für die Rayleigh-Streuung kann durch Auflösen der kumulativen Phasenfunktion (3.14) nach  $\theta_s$ , direkt der Streuwinkel berechnet werden [38].

$$\cos \theta_s = \sqrt[3]{-q + \sqrt{1 + q^2}} \quad (5.2)$$

wobei  $q = 4RN - 2$  ist. Für die Mie-Streuung kann keine analytische Lösung der kumulativen Phasenfunktion bestimmt werden. Häufig wird die Streuung an Wolkentröpfchen auch mithilfe der Henyey-Greenstein-Phasenfunktion  $P_{HG}$  simuliert [38].

$$P_{HG}(\theta_s) = \frac{1 - g^2}{(1 + g^2 - 2g \cos \theta_s)^{\frac{3}{2}}}, \quad (5.3)$$

wobei  $g$  der Asymmetriefaktor ist. Die Henyey-Greenstein-Funktion reproduziert in guter Näherung das Vorwärtsstreu-Verhalten der exakten Mie-Phasenfunktion, gibt jedoch das rückwärts gerichtete Streuverhalten der Mie-Phasenfunktion schlecht wieder [64]. Für die Henyey-Greenstein-Phasenfunktion ist es möglich, die kumulative Phasenfunktion analytisch zu bestimmen und somit den Streuwinkel direkt zu berechnen [38].

#### 5.4.2.2 Drehung des mitgeführten Systems

Marchuk [36] fand eine Darstellung der Drehmatrix (3.17), durch die die rechenzeitintensiven Auswertungen der inversen trigonometrischen Funktionen zur Bestimmung der Drehwinkel  $\theta$  und  $\phi$  (siehe S. 26) vermieden werden können. Sie werden durch Kombinationen der Komponenten des im Monte-Carlo-Programm schon berechneten Einheitsvektors, der in die Flugrichtung des Photons ( $a_i, b_i, c_i$ ) vor dem Streuprozess zeigt, ausgedrückt

$$a_i = \cos \phi \sin \theta \quad (5.4)$$

$$b_i = \sin \phi \sin \theta \quad (5.5)$$

$$c_i = \cos \theta, \quad (5.6)$$

So können die Drehwinkel  $\theta$  und  $\phi$  wie folgt ersetzt werden:

$$\cos \theta = c_i \quad (5.7)$$

$$\sin \theta = \sqrt{1 - c_i^2} \quad (5.8)$$

$$\sin \phi = \frac{b_i}{\sqrt{1 - c_i^2}} \quad (5.9)$$

$$\cos \phi = \frac{a_i}{\sqrt{1 - c_i^2}}. \quad (5.10)$$

Somit ergibt sich die neue Richtung des Photons  $(a_{i+1}, b_{i+1}, c_{i+1})$

$$a_{i+1} = a_i \cos \theta_s - (b_i \sin \phi_s + a_i c_i \cos \phi_s) d_i \quad (5.11)$$

$$b_{i+1} = b_i \cos \theta_s - (a_i \sin \phi_s + b_i c_i \cos \phi_s) d_i \quad (5.12)$$

$$c_{i+1} = c_i \cos \theta_s - (1 - c_i^2) \cos \phi_s d_i \quad (5.13)$$

wobei

$$d_i = \sqrt{\frac{1 - \cos^2 \theta_s}{1 - c_i^2}} \quad (5.14)$$

ist.

### 5.4.3 Absorption

Für die Absorption werden zwei Optimierungen beschrieben. Die erste ist eine kleinere Optimierung des bestehenden Verfahrens zur Simulation der Absorption. Die zweite ist eine grundlegende Änderung mit hohem Potential zur Beschleunigung von Simulationen, die sich über größere Wellenlängenintervalle erstrecken.

#### 5.4.3.1 Optimierung des bestehenden Verfahrens

Die Optimierung des bestehenden Verfahrens zur Simulation der Absorption orientiert sich an der im Modell MYSTIC von Mayer [8] verwendeten Methode. In der jetzigen Version wird nach jedem Durchqueren einer Box das Gewicht des Photons  $w$  neu berechnet.

$$w_{i+1} = w_i \exp(-k_{abs,i} s_i), \quad (5.15)$$

wobei  $s_i$  die Flugstrecke innerhalb der Box  $i$  ist. Hierdurch ist das Gewicht des Photons für jeden Ort bekannt. Ist der Nutzer nur an Ergebnissen an bestimmten Orten interessiert, wie zum Beispiel der Einstrahlung am Boden, so muss nicht nach Durchqueren jeder Box das Gewicht des Photons neu ausgerechnet werden. Stattdessen wird die optische Dicke aufsummiert, bis das Photon den Ort des Interesses erreicht, erst dann wird das Gewicht des Photons neu errechnet.

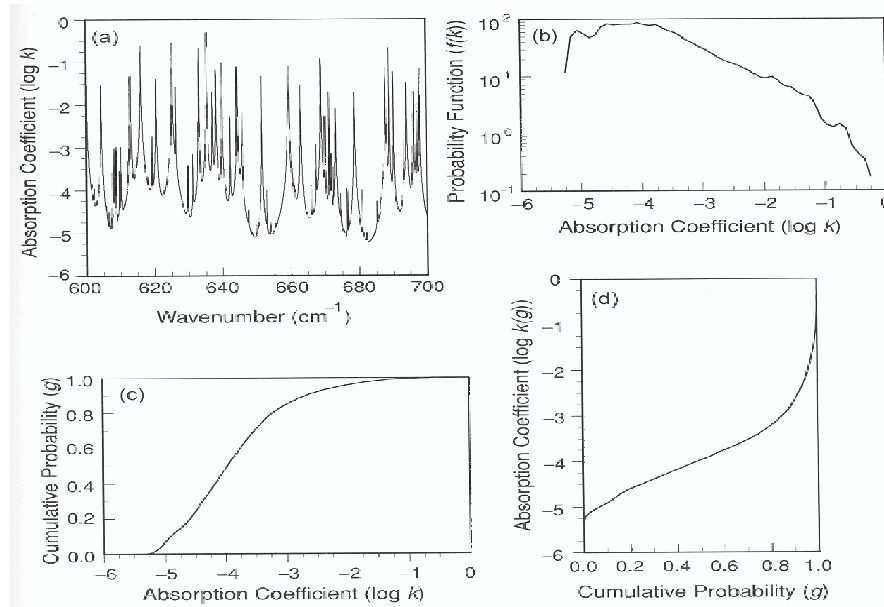
$$w_{i+n} = w_i \prod_{j=1}^n \exp(-k_{abs,j} s_j) = w_i \exp\left(-\sum_{j=1}^n k_{abs,j} s_j\right), \quad (5.16)$$

wobei  $n$  die Anzahl der passierten Gitterzellen ist. Durch dieses Verfahren wird die Anzahl der Aufrufe der rechenzeitintensiven Exponentialfunktion auf ein Minimum reduziert.

### 5.4.3.2 Die correlated-k-Methode

Die zweite hier beschriebene Optimierungsmethode, die *correlated-k*-Methode, ist eine wesentlich größere Änderung von Promt als das im vorangegangenen Kapitel beschriebene Verfahren. Mithilfe der *correlated-k*-Methode können wellenlängenintegrierte Ergebnisse wesentlich schneller als mit der bisher verwendeten, nach Wellenlänge geordneten Simulation berechnet werden. Der Nachteil des Verfahrens ist, dass keine spektrale Information des Ergebnisses mehr vorliegt.

Wie in Kapitel 4.1.2 beschrieben, ist es kompliziert, ein geeignetes Verfahren zur Bestimmung des effektiven Absorptionskoeffizienten für einen Wellenlängenintervall zu finden, da der Absorptionsquerschnitt sehr stark mit der Wellenlänge variiert. Das *correlated-k*-Verfahren reduziert den Fehler der Mittelung bedeutend, indem es die Absorptionskoeffizienten  $k$  ihrer Größe nach sortiert<sup>1</sup>, siehe Abbildung 5.2 (a). Der über das Frequenzintervall  $\Delta\nu$  gemittelte Transmissionsgrad  $T_{\bar{\nu}}$



**Abbildung 5.2:** Die Abbildung zeigt unter (a) den Absorptionskoeffizienten von Wasser bei 600 hPa und einer Temperatur von 260 K in Abhängigkeit der Wellenzahl. In (b) ist die Wahrscheinlichkeitsfunktion  $f(k)$  und in (c) die kumulative Wahrscheinlichkeitsfunktion  $g(k)$  abgebildet. Die inverse Funktion  $k(g)$  ist in (d) dargestellt, [34].

kann mithilfe der normalisierten Wahrscheinlichkeitsverteilung  $f(k)$  des Absorptionskoeffizienten  $k_{\nu}$ , siehe Abbildung 5.2 (b), im Frequenzintervall  $\Delta\nu$  ausgedrückt werden [34]

$$T_{\bar{\nu}} = \int_{\Delta\nu} e^{-k_{\nu}s} \frac{d\nu}{\Delta\nu} = \int_0^{\infty} e^{-ks} f(k) dk, \quad (5.17)$$

wobei  $s$  der zurückgelegte Weg ist. Die kumulative Wahrscheinlichkeitsverteilung  $g(k)$ , siehe Abbildung (c),

$$g(k) = \int_0^k f(k') dk' \quad (5.18)$$

ist eine stetige, monoton steigende Funktion. Daher gibt es eine Umkehrfunktion  $k(g)$  mit  $dg = f(k)dk$ , siehe Abbildung 5.2 (d). Durch Substitution der Variablen

<sup>1</sup>In diesem Abschnitt wird der Index *abs* des Absorptionskoeffizienten  $k_{abs}$  weggelassen.

folgt für den gemittelten Transmissionsgrad

$$T_{\bar{\nu}} = \int_0^1 e^{-k(g)u} dg. \quad (5.19)$$

Der glatte Verlauf von  $k(g)$  kann mit erheblich geringerem Aufwand numerisch dargestellt werden als die starke Variabilität des Absorptionskoeffizienten mit der Wellenlänge.

Diese soeben geschilderte Herleitung ist nur für homogene Schichten gültig. Für die Anwendung der *correlated-k*-Methode in einer inhomogenen Atmosphäre muss gewährleistet werden, dass die Umsortierung der Absorptionskoeffizienten in jeder Schicht in der gleichen Art und Weise geschehen kann. Insbesondere die Druckverbreiterung wirkt sich auf die Überlappung der Absorptionslinien aus und schränkt so die Wellenlängenbereiche ein, in denen die *correlated-k*-Methode angewandt werden kann. In einem Artikel von Kato, Ackerman, Mather und Clothiaux [26] wird die *correlated-k*-Methode auf diesen Grundlagen [34] aufbauend beschrieben.

## 5.5 Methode der Parallelisierung

Da die Bewegung einzelner Photonen vollkommen unabhängig voneinander berechnet werden kann, ist die Monte-Carlo-Simulation gradezu ideal für eine Parallelisierung geeignet. Die in dieser Arbeit verwendete Methode verteilt die zu simulierenden Photonen gleichmäßig auf die verwendeten Prozessoren.

Eine weitere Möglichkeit die Parallelisierung zu realisieren ist die Methode der Gebietsaufteilung, die vor allem bei der Kopplung von Promt und PALM Vorteile bringt. Hierbei werden die Photonen eines Gebietes zu einem Vektor zusammengefasst. Die Bewegung der Photonen wird für alle Photonen des Gebietes gleichzeitig berechnet. Wenn ein Photon das Gebiet verlässt, das einem Prozessor zugeordnet ist, so wird dieses Photon aus dem Photonenvektor dieses Gebietes herausgenommen und an den des angrenzenden Gebietes angehängt. Die Vorteile dieser Methode ist, dass die Parallelisierung von Promt konsistent mit der von PALM ist, das auch die Gebietsaufteilung benutzt. Daher ist das Wolkenfeld schon verteilt in den Speicher geschrieben und kann direkt mit dieser Aufteilung genutzt werden, um die optischen Eigenschaften des Wolkenfeldes zu berechnen, die dann wiederum in der richtigen Verteilung im Speicher vorhanden sind. Die Verteilung der Felder der optischen Eigenschaften im Speicher ist insbesondere bei sehr großen Modellgebieten notwendig, da mit der derzeit verwendeten Methode eine Kopie der Felder in jedem Knoten verfügbar sein müsste und der zur Verfügung stehende Speicherplatz hierfür evtl. nicht ausreicht. Der Nachteil der Parallelisierung mithilfe der Gebietsaufteilung ist der höhere Kommunikationsaufwand zwischen den Clustern beim Austausch von Photonendaten.

# Kapitel 6

## Mögliche Anwendungsgebiete

Die Berechnung des Strahlungstransfers ist in vielen Fällen von Nutzen. In diesem Kapitel werden einige Beispiele gegeben, wofür die Simulationsergebnisse von Prompt verwendet werden können. Zum Teil sind dafür noch einige der im vorangegangenen Kapitel beschriebenen Erweiterungen notwendig oder zumindest empfehlenswert.

### 6.1 Einfluss von Wolken auf die Turbulenz der bodennahen Grenzschicht

In Abschnitt 4.2.1 wird gezeigt, dass unter einem inhomogenen Wolkenfeld auch horizontal unterschiedliche Einstrahlung zu erwarten ist. Schumann, Dörnbrack und Mayer [57] untersuchten den Einfluss von inhomogenen Wolken auf die turbulenten Strukturen in der Grenzschicht mithilfe einer LES-Simulation. Anstatt einer vollständigen Strahlungstransfer-Simulation wurde ein einfaches konzeptionelles Modell verwendet, das unterhalb der Wolke totalen Schatten annimmt. Sie zeigten, dass sich bei inhomogener Einstrahlung kleinere konvektive Strukturen entwickeln als im wolkenlosen Referenzfall. Unsymmetrien infolge Schattens bei schrägstehender Sonne hingegen haben nur einen sehr kleinen Einfluss auf das turbulente Bewegungsfeld. Im Ausblick der Veröffentlichung wird empfohlen, weiterführende Studien durchzuführen, in denen das konzeptionelle Modell durch ein komplexeres Strahlungstransfermodell ersetzt wird und das LES-Modell eine möglichst realistische Wolkenphysik hat.

Das Institut für Meteorologie und Klimatologie der Universität Hannover verfügt mit PALM über ein LES-Modell und mit Prompt über ein Strahlungstransfermodell, die für die vorgeschlagenen Untersuchungen geeignet sind. Hierfür müssen PALM und Prompt miteinander gekoppelt werden, so dass Prompt eine Strahlungstransferrechnung für das von PALM simulierte Wolkenfeld durchführt und PALM das von Prompt berechnete Einstrahlung am Boden nutzt. Eine notwendige Erweiterung von PALM hierfür ist die Berechnung der Energiebilanz an der Bodenoberfläche unter Berücksichtigung der Einstrahlung, des Boden- und des turbulenten Wärmestroms, um die Erwärmung des Erdbodens zu ermitteln. Da das Wolkenfeld dynamisch ist, ändert sich auch der Strahlungstransfer mit der Zeit. Es muss weiterhin untersucht werden, in welchen Zeitintervallen eine Strahlungstransfer-Simulation durchgeführt werden muss, die wesentlich mehr Rechenzeit benötigt als die Berechnung eines Zeitschrittes durch PALM. Es ist auch denkbar, den Aufruf der Strahlungstransfer-Simulation in Abhängigkeit von der Änderung des Wolkenfel-

des zu steuern.

Weiterhin ist auch die Wechselwirkung von Konvektion und thermischem Strahlungstransfer ein aktuelles Forschungsthema. Fu, Krüger und Liou [15] untersuchten diese mithilfe eines zwei-dimensionalen Kumulus-Ensemble-Modells (CEM) für tropische Wolkenfelder. Sie diskutieren drei Mechanismen der Wechselwirkung von Strahlung und Konvektion. Erstens die Destabilisierung der Umgebung durch langwellige Ausstrahlung des Bodens, zweitens die Abkühlung der Wolkenspitze und Erwärmung der Wolkenbasis und drittens das Entstehen einer Sekundärzirkulation aufgrund von differentieller Erwärmung zwischen bewölkten und wolkenfreien Regionen. Alle drei Mechanismen verstärken die Konvektion und den Niederschlag. Mit einem gekoppelten PALM-Promt Modell kann die Wechselwirkung von Konvektion und thermischem Strahlungstransfer in drei Dimensionen untersucht werden. Promt ist auch für Simulationen mit Wellenlängen im thermischen Bereich ausgelegt. In dieser Diplomarbeit wurden jedoch nur Simulationen bis zu 3000 nm durchgeführt.

Fu, Krüger und Liou [15] stellten weiterhin fest, dass eine Variation der Größenverteilung der Wolkentröpfchen einen signifikanten Einfluss auf den langwelligen Strahlungstransfer hat. Für Untersuchungen in diese Richtung müssten entweder die mikrophysikalischen Eigenschaften der Wolken durch PALM prognostiziert werden oder phänomenologische Zusammenhänge zwischen dem von PALM simulierten Flüssigwassergehalt und dem Wolkentröpfchenspektrum angenommen werden.

## 6.2 Einfluss von Aerosolen auf den Strahlungstransfer

Die anthropogene Emission von Aerosolen hat seit der vorindustriellen Zeit bis heute bedeutend zugenommen. Daher ist der Einfluss der Aerosole auf den Strahlungstransfer ein aktuelles Forschungsthema.

Aerosole streuen und absorbieren thermische sowie solare Strahlung. Dies wird als *direkter Aerosoleffekt* bezeichnet und im Detail in einer Veröffentlichung von Haywood und Boucher [20] beschrieben. Kylling et. al [31] führten 1996 in Griechenland eine Messkampagne zum direkten Aerosoleffekt im UV-Bereich durch. Die gemessene Einstrahlung im UV-Bereich für wolkenfreie Situationen unterschied sich um bis zu 5 % von der modellierten. Es wurde weiterhin festgestellt, dass während der Kampagne die Änderung des Aerosolgehaltes einen größeren Einfluss auf die UV-Einstrahlung am Boden hatte als die Änderung der Ozonsäule.

Weiterhin haben Aerosole Einfluss auf die Bildung von Wolken und Niederschlag, die wiederum bestimmend für den Transport von Aerosolen sind, da diese in den Hydrometeoren aufgenommen und durch Niederschlag ausgewaschen werden können. Durch erhöhte Absorption durch Aerosole erwärmt sich die Luft. Dies kann bewirken, dass Wolkentröpfchen verdampfen. Dieser Effekt wird *semi-direkter Aerosoleffekt* genannt und wird von Hansen et al. [19] beschrieben. Aerosole können auch als Kondensationskerne für Wasser- und Eiswolken dienen. Dies wird als indirekter Effekt bezeichnet und wird ausführlich in einer Veröffentlichung von Lohmann und Feichter [35] diskutiert. Das vorhandene Flüssigwasser wird auf eine größere Anzahl von Tropfen verteilt, die jedoch kleiner sind, im Vergleich zu den Tropfen ohne Aerosoleinfluss. Zum einen sinkt dadurch die Wahrchein-

lichkeit, dass Niederschlag aus dieser Wolke fällt, wodurch sich ihre Lebensdauer verlängert. Dies wird als *Wolken-Lebenszeit-Effekt* bezeichnet [1]. Zum anderen wird die Reflektivität von Wolken mit der Tropfenanzahl größer. Dieser Effekt wird als *Twomey-Effekt* bezeichnet. Laut dem IPCC Third Assessment Report verringert sich die globale Einstrahlung aufgrund des Twomey-Effekts um bis zu  $2 \text{ W/m}^2$ . Die Unsicherheit der Klimawirkung des Twomey-Effekts ist größer als bei jedem anderen untersuchten Einflussfaktor und unterstreicht den Forschungsbedarf.

Mit einem gekoppelten Modell PALM-Prompt können prinzipielle, lokal begrenzte Studien zum indirekten Aerosoleffekt durchgeführt werden. Um den direkten Aerosoleffekt zu studieren, muss die in Abschnitt 5.2 beschriebene Erweiterung von Prompt zur Berücksichtigung von Aerosolen beim Strahlungstransfer durchgeführt werden. Weiterhin werden Informationen über die Aerosolverteilung in der Atmosphäre benötigt. Mögliche Datenquellen können Messkampagnen oder LES-Simulationen sein. So kann beispielsweise geprüft werden, inwiefern die in PALM eingebaute Simulation des Partikeltransports zur Bestimmung einer Aerosolverteilung geeignet ist.

Für Untersuchungen zum indirekten Aerosoleffekt muss eine Erweiterung an PALM vorgenommen werden, so dass den Einfluss von Aerosolen auf die Wolkenbildung berücksichtigt werden kann. Die prinzipiellen Grundlagen der hierfür relevanten Prozesse werden beispielsweise am Institut für Troposphärenforschung in Leipzig mithilfe des Leipzig Aerosol Cloud Interaction Simulator (LACIS) untersucht [66]. Prompt kann im Anschluss daran dazu verwendet werden, den drei-dimensionalen Strahlungstransfer unter Berücksichtigung des von PALM generierten Wolkenfelds zu berechnen.

## 6.3 Biologische Anwendung

Organismen reagieren abhängig von der Wellenlänge auf verschiedenste Weise auf eingestrahlte Strahlung, siehe 5.2. Daher ergeben sich zahlreiche Anwendungsmöglichkeiten in verschiedenen biologischen Bereichen. Durch die große Flexibilität des Monte-Carlo-Verfahrens könnten solche Simulationen mit den entsprechenden in 5.1 und 5.2 beschriebenen Erweiterungen für beliebig komplexe Geländeformen wie Gebirge oder Städte durchgeführt werden. Die grundsätzliche Eignung von Prompt für Simulationen mit stark inhomogenem Albedofeld wurde im Abschnitt 4.2.2 dieser Arbeit demonstriert. Somit könnte beispielsweise die von Smolskaia [64] durchgeführten Untersuchungen zur UV-Belastung von Phytoplankton entlang der Antarktischen Eiskante fortgesetzt werden, indem das Modellgebiet der Strahlungstransfer-Simulation auf die Region unterhalb der Wasseroberfläche erweitert wird. Somit könnte die UV-Belastung des Phytoplankton direkt im Wasser in Abhängigkeit der Tiefe simuliert werden.

Bei biologischen Untersuchungen sollte allerdings bedacht werden, dass meist die Strahlendosis über Zeiträume von einigen Monaten betrachtet wird. Strahlungstransfer-Simulationen hingegen bestimmen jedoch die Bestrahlungsstärke zu einem Zeitpunkt, so dass zu erwarten ist, dass zahlreiche Modell-Läufe für diese Art von Anwendungen durchgeführt werden müssten.

## 6.4 Fernerkundung von Wolken

Mayer präsentierte auf dem International Radiation Symposium 2004 einen iterativen Algorithmus, der aus einem Strahldichtefeld die optische Dicke von Wolken bestimmt. Die geometrische Form der Wolken wurde dabei vorgegeben. Die Fernerkundung von Wolken ist wegen ihrer komplexen Struktur und zeitlichen Variabilität sehr schwer. Da Wolken den Strahlungstransfer entscheidend beeinflussen, ist die genaue Vermessung von Wolkenfeldern auch für viele Bereiche der Fernerkundungsverfahren von großer Bedeutung.



# Kapitel 7

## Zusammenfassung

Im Rahmen dieser Diplomarbeit wird das drei-dimensionale Monte-Carlo-Strahlungstransfer-Modell *Prompt* (Programm for Monte-Carlo simulation of radiative transfer) entwickelt. *Prompt* simuliert den kurzwelligen Strahlungstransfer durch die Atmosphäre für Wellenlängen bis  $3000\text{ nm}$  unter Berücksichtigung der Rayleigh-Streuung, der Absorption durch Wasserdampf, Kohlendioxid, Sauerstoff, Ozon und Flüssigwasser von Wolken sowie der Mie-Streuung an Wolkentröpfchen und der Reflektion am Untergrund.

- **Flexible Bedienung**

Die Einstellbarkeit zahlreicher Parameter ermöglicht die Simulation einer großen Bandbreite von Szenarien. Unter anderem können der Sonnenzenitwinkel, die Größe des Modellgebiets, die Absorption einzelner Gase, ein inhomogenes Untergrund und ein drei-dimensionales inhomogenes Wolkenfeld vorgegeben werden. Druck- und Temperaturprofil der Atmosphäre können der geographischen Breite und der Jahreszeit angepasst werden.

- **Simulationsergebnisse**

Die Simulationsergebnisse von *Prompt* sind die Bestrahlungsstärke am Boden, die Reflektivität der Atmosphäre und die Wolkenalbedo in Abhängigkeit der horizontalen Position, der direkte und der diffuse Anteile der Bestrahlungsstärke in Abhängigkeit der räumlichen Position sowie die Profile der Bestrahlungsstärke und der Absorption.

Durch den Vergleich mit anderen Modellen wie *libRadtran*, MYSTIC und UVTRIS wird die Simulationsqualität von *Prompt* bestimmt.

- **Vergleich ein-dimensionalen Simulationen mit *libRadtran***

Für jeden von *Prompt* simulierten Prozesse wird das Modell in ein-dimensionalen Fallstudien mit dem validierten Strahlungstransfermodell *libRadtran* verglichen: Wenn ausschließlich Rayleigh-Streuung bei einer Simulation berücksichtigt wird, weicht der von *Prompt* simulierte spektrale Transmissionsgrad um weniger als 0.6 % von dem von *libRadtran* simulierten ab.

Die Absorption kann von *Prompt* mit verschiedenen Methoden simuliert werden: Mit *Prompt* können zum einen *line-by-line*-Simulationen durchgeführt werden, bei denen einzelne Absorptionslinien spektral aufgelöst werden. In einen stichprobenartigen Vergleich weicht der von *Prompt* simulierte spektrale Transmissionsgrad für einen Großteil der Wellenlängen um nicht mehr als 2.1 % von dem Ergebnis einer mit *libRadtran* durchgeführten *line-by-line*-Simulationen ab.

Des weiteren verfügt Promt über zwei Verfahren zur Berechnung von gemittelten Absorptionskoeffizienten. Verwendet Promt über  $1\text{ nm}$  gemittelte Absorptionskoeffizienten, so ist die von Promt simulierte solare Bestrahlungsstärke um 1 % bis 2 % zu gering. Eine *libRadtran*-Simulation, die von dem Modell LOWTRAN gemittelte Absorptionskoeffizienten verwendet, überschätzt die Bestrahlungsstärke um etwa den gleichen Betrag.

Die optischen Eigenschaften von Wolken werden in Promt mithilfe der Mie-Theorie berechnet. Im Vergleich zu der parametrisierten Darstellung der Wolken in *libRadtran* treten methodisch bedingte Unterschiede auf. Wird die Absorption durch Gase und Wolken gleichzeitig simuliert, so gleichen sich die spektralen Unterschiede bei der Simulation der solaren Bestrahlungsstärke größtenteils gegenseitig aus. Für die untersuchten Fälle horizontaler homogener Bewölkung unterscheidet sich die von Promt simulierte Bestrahlungsstärke um weniger als 1.8 % von der durch *libRadtran* simulierten Bestrahlungsstärke, wobei *libRadtran* LOWTRAN-Absorptionskoeffizienten verwendet.

- **Vergleich drei-dimensionaler Simulationen mit MYSTIC und UVTRIS**

Im weiteren wird die drei-dimensionale Simulation des Strahlungstransfers untersucht.

Promt berechnet den Strahlungstransfer für ein von dem LES-Modell PALM generiertes drei-dimensionales inhomogenes Wolkenfeld. Die Ergebnisse werden mit denen des Modells MYSTIC verglichen. Promt simuliert einen um 1.27 % kleineren horizontal gemittelten spektralen Transmissionsgrad als MYSTIC. Die räumliche Struktur der Einstrahlung wird von beiden Modellen in so großer Übereinstimmung simuliert, dass die statistische Streuung des Monte-Carlo-Verfahrens größer als ein möglicher weiterer Unterschied ist. Bei der horizontalen Verteilung der Bestrahlungsstärke wird eine ähnliche gute Übereinstimmung erzielt, das horizontale Mittel ist für Promt um 3.4 % höher als für MYSTIC. Dies wird durch die unterschiedlichen Ansätze zur Berechnung der optischen Eigenschaften der Wolken verursacht. Der Vergleich der Profile der horizontal gemittelten Bestrahlungsstärke wird durch die Verwendung unterschiedlicher vertikaler Koordinatensysteme von Promt und MYSTIC erschwert. Dennoch sind die Abweichungen für alle Anteile der Bestrahlungsstärke im LES-Gebiet kleiner als 5.7 %. In der Atmosphäre über dem LES-Gebiet simuliert Promt eine bis zu 2.8 % höhere diffus nach oben gerichtete und eine um bis zu 2.0 % kleinere direkte Bestrahlung als MYSTIC. Die Ursache konnte bisher noch nicht ermittelt werden.

In einer zweiten Studie wird von Promt die Strahlungsüberhöhung für ein Modellgebiet, das zur Hälfte aus Schnee und zur Hälfte Wasser besteht, simuliert. Reflektion am Boden, Rayleigh-Streuung und Absorption bestimmen die Änderung der Strahlungsüberhöhung in Abhängigkeit von der Entfernung zur Grenze. Die Charakteristik der Abnahme der Bestrahlungsstärke in der Nähe der Eiskante wird von Promt und UVTRIS für verschiedenen Wellenlängen in ähnlicher Weise simuliert. Die maximale Abweichung der Modelle von 2.5 % tritt bei  $\lambda = 315\text{ nm}$  auf. Die Ursache hierfür ist mit großer Wahrscheinlichkeit die Überschätzung der Absorption durch Promt aufgrund der Verwendung von gemittelten Absorptionskoeffizienten.

- **Genauigkeit des Monte-Carlo-Verfahrens**

Die Simulationsgenauigkeit des Monte-Carlo-Verfahrens hängt von der Anzahl der simulierten Photonen ab. Für Promt wird gezeigt, dass die erzielte Genauigkeit

der Theorie entsprechend mit der Anzahl der simulierten Photonen zunimmt.

- **Schnelligkeit durch Parallelisierung**

Prompt wird für den gleichzeitigen Einsatz auf mehreren Prozessoren parallelisiert. Testläufe auf einem Parallelcomputer zeigen eine gute Skalierung für weniger als 8 Prozessoren, jedoch auch eine unerwartete Zunahme der Rechenzeit bei der Nutzung von 8 und 9 Prozessoren.

- **Entwicklungs-Potential**

Am Ende der Arbeit werden Weiterentwicklung und Erweiterung von Prompt sowie die Optimierung des Modells diskutiert. Das Simulationsverfahren der Monte-Carlo-Methode ermöglicht die Berechnung aller für den Strahlungstransfer relevanten Größen. Daher bieten sich viele Möglichkeiten zur Erweiterung an. Ein großes Potential zur Beschleunigung der Berechnung ist durch den optimierte Einsatz der simulierten Photonen und durch den Einsatz der *correlated-k*-Methode zu erwarten.

- **weitere Verwendung von Prompt**

Das Monte-Carlo-Verfahren ist, zusammen mit der SHDOM-Methode von Evans, die exakteste Methode zur Simulation des Strahlungstransfers. Es wird daher für Anwendungen eingesetzt, bei denen eine sehr genaue Simulation des Strahlungstransfers von Interesse ist, insbesondere zur Untersuchung des Einflusses horizontaler Inhomogenitäten auf den Strahlungstransfer. Es ist vorstellbar, dass Prompt zukünftig für Studien zu aktuellen Forschungsthemen wie der Wechselwirkung von Strahlung und Konvektion, dem indirekten Aerosoleffekt oder der Simulation von biologisch wirksamer Bestrahlungsstärke im inhomogenen Gelände eingesetzt wird. Der Grundstein hierfür wurde mit dieser Arbeit gelegt.

# Anhang A

## Verwendete Symbole

Bei der Verwendung von Symbolen wurden die in der Literatur verwendete Schreibweise verwendet. Da der Hauptteil der Literatur und die Kommentare und Variablennamen in Prompt in Englisch sind, wurden englische Abkürzungen und Indizes verwendet.

Symbol	Maßeinheit	Bedeutung
$\beta_s$	$1/m$	Streukoeffizient
$\delta$	1	Anisotropiefaktor
$\varepsilon$	1	Dielektrizitätskonstante
$\theta$	Grad	Winkel zwischen Flugrichtung vor und nach der Streuung
$\lambda$	$m$	Wellenlänge
$\mu$	1	magnetische Permeabilität
$\nu$	Hz	Frequenz
$\varphi$	Grad	Winkel zwischen Flugrichtung und $x$ -Achse
$\rho_c$	$kg/m^3$	Dichte des Flüssigwassers in Wolken
$\sigma_{sca}$	$m^2$	Streuquerschnitt
$\sigma_{abs}$	$m^2$	Absorptionsquerschnitt
$\sigma_e$	$m^2$	Extinktionsquerschnitt
$\tau$	1	optische Dicke
$\tau_{pot}$	1	potentieller Weg
$\phi$	Grad	Polarkoordinate
$\phi_s$	Grad	Streuwinkel
$\theta$	Grad	Polarkoordinate
$\theta_s$	Grad	Streuwinkel
$\Omega$	sr	Raumwinkel

**Tabelle A.1:** Tabelle der verwendeten Symbole, griechische Buchstaben

Symbol	Maßeinheit	Bedeutung
$(a, b, c)^t$	1	auf Eins normierter Vektor in Flugrichtung des Photons
$A$	1	Albedo (Reflektionskoeffizient)
$\vec{B}$	T	magnetische Flussdichte
$c$	m/s	Lichtgeschwindigkeit
$E$	J	Energie
$\vec{E}$	V	elektrische Feldstärke
$F$	$W/(m^2)$	Bestrahlungsstärke
$F_{dir}$	$W/(m^2)$	direkter Teil der Bestrahlungsstärke
$F_{dif}$	$W/(m^2)$	diffuser Teil der Bestrahlungsstärke
$F_{bio}$	$W/(m^2)$	biologisch wirksame Bestrahlungsstärke
$I$	$W/(m^2 sr)$	Strahlungsdichte
$J_{n+\frac{1}{2}}$		Bessel-Funktion
$k$	$1/m$	Wellenzahl
$k_{abs}$	$1/m$	Absorptionskoeffizient
$k_{ext}$	$1/m$	Extinktionskoeffizient
$K$	J/K	Boltzmann-Konstante
$LWC$	kg/kg	Flüssigwassergehalt
$n$	$1/m^3$	Teilchendichte
$n$	1	Photonenanzahl
$m$	$\epsilon$ C	komplexer Brechungsindex
$N_{n+\frac{1}{2}}$		Neumann-Funktion
$p$	Pa	Druck
$P$	1	Phasenfunktion
$P_{cum}$	1	kumulative Phasenfunktion
$P_n$	1	Legendre-Polynom
$P_n^m$	1	assoziiertes Legendre-Polynom
$Q_{abs}$	1	Absorptionseffizienz
$Q_e$	1	Extinktionseffizienz
$Q_{sca}$	1	Streuungseffizienz
$\vec{r}$	$m$	Ortsvektor
$r$	$m$	Betrag des Ortsvektors
$r_0$	$m$	Radius der Wolkentröpfchen
$RN$	1	Zufallszahl
$T$	K	Temperatur
$w$	1	Gewicht eines Photons
$W$	1	biologische Wirkungsfunktion
$x$	1	Größenparameter
$x, y, z$	$m$	Koordinatensystem
$zz_i$	$m$	Höhe der Grenzflächen

**Tabelle A.2:** Tabelle der verwendeten Symbole, deutsche Buchstaben

## Beispiel einer control Datei

#####

---

---

-----

[illegible]

```

        albedo2 = 0.90, ground_type2 = 2,
albedo_file = 'data_alb/ALBEDO.DAT',
ground_file = 'data_alb/GROUND.DAT' /

- ground_reflection, 0 = black underground
                        1 = reflecting ground
- albedo_type        , 1 = horizontal homogenous
                        2 = half and half
                        ( x > xn/2 is albedo2)
                        3 = from file
- albedo              , ground albedo
                        real from 0.0 to 1.0
- ground_type        , 1 = Lambertian reflector
                        2 = mirror reflection
- albedo2            , ground albedo
                        real from 0.0 to 1.0
                        ( for x > xn/2 )
- ground_type2       , 1 = Lambertian reflector
                        2 = mirror reflection
                        ( for x > xn/2 )
- albedo_file        , file from which albedo is
                        read

```

```
#####
```

#### PHOTONS

```
-----
```

give parameter about photons :

```

&photon_data  photons=20, store_every=1000,
               lambda_start=0.288, lambda_end=1.357,
               delta_lambda=0.001, e_phot_min=1.E-7 /
               - photons is the number of photons
                 per cell grid
               - every store_every photons,
                 intermediate results are saved
               - lambda_start is the smalest simulated wavel.
               - lambda_end is the largest simulated wavel.
               - delta_lambda wavelengthstep
               - e_phot_min is the lowest
                 photon - energy

```

```
#####
```

#### SPECTRUM

```
-----
```

```
&spectrum_number  ispec = 7 /
```

```

1 = 'apm_0_5nm.dat'           ! atlas plus modtran convolved
                               ! with 0.5nm triangular function
2 = 'apm_1_0nm.dat'           ! atlas plus modtran convolved
                               ! with 1.0nm triangular function
3 = 'atlas2.dat'               ! Source: Bernhard Meyer
4 = 'atlas3.dat'               !      -"-
5 = 'atlas_plus_modtran.dat'   !      -"-
6 = 'kurudz_0_1nm.dat'         ! www.meto.umd.edu/~bobe/LBLRTM,
                               ! 250nm - 10,000nm, resol. 0.1nm
7 = 'kurudz_1_0nm.dat'         ! www.meto.umd.edu/~bobe/LBLRTM,
                               ! 250nm - 10,000nm, resol. 1.0nm

#####

      MODELL ATMOSPHERE

-----

      select vertical profile :

&profile   iprof = 1  /
              1 = us standart atmosphere (afglus.dat)
              2 = mid-latitude summer (afglms.dat)
              3 = mid-latitude winter (afglmw.dat)
              4 = sub-arctic summer (afglss.dat)
              5 = sub-arctic winter (afglss.dat)
              6 = tropical (afglt.dat)

#####

      ABSORPTION

      set interactions with gas-molecules :
      -----

&gaseous_interaction  gas_interact = 1  /
      - gas_interact, 0 = no gas absorption
      1 = gas absorption is enabled

      set gaseous absorption :
      -----

&gas_abs  h2o = 1, o2 = 1, co2 = 1, o3 = 1 /
              0 = no absorption by these molecules
              1 = absorption by these molecules

      set calculation mode :

&calcmode broad = 1, delta_lambda_abs = 0.001 /

```



---

```

        0 = monochromatic or extremely narrow band
        1 = broadband calculation
        (2 = correlated-k for solar spectrum
          (not available jet))

- delta_lambda_abs in micrometer
  for delta_lambda_abs > 0.001 micro m use broad = 1

select line shape :

&line_shape  shape = 3  /
    - shape, 1 = voigt line shape
              2 = lorentz line shape
              3 = voigt line shape is used
                  if aL <= 12aD and lorentz
                  line shape is used if
                  aL > 12 aD

        NOTE : lorentz line shape is faster to
              calculate but its range of
              application is limited to lower
              atmosphere (high pressure)

&abs_location lili_dir      =  '/data/hamann/data_abs/',
      lilibroad_dir =  '/data/hamann/b_data_abs/'  /

        absorption data will be saved for future calculation
        in this directory

#####

        CLOUDS

-----

&clouds cloud_interaction = .TRUE.,
      cloud_type = 3,
      cloudfile_1D = 'data_clouds/WC_1km.DAT',
      even_cloud = .TRUE.,
      r_even = 10.0,
      cloudfile_LES = '/data/hamann/Wolken_Heiko/ql_data',
      nx_LES=95 , ny_LES=95 , nz_LES=70,
      dx_LES=300.0, dy_LES=300.0, dz_LES=50.0,
      nx_offset = 0, ny_offset = 0,
      cloud_albedo=.FALSE. /

- cloud_interaction, switch on/off

- cloud_type, 1 = 1D clouds (horizontal homogenous
                  cloud data from cloudfile_1D)
                2 = simple cloud geometries (variations of 1),

```

```

        half covered sky ( x_p<x(x_n)/2 )
3 = 3D LES cloud
        3D cloud data from cloudfile_3D

- cloud_file, file name of file with 1D-cloud profile

- even_cloud, .FLASE. = phasefunction is a function of space
                    (0 is not available for cl.type 3 jet)
        .TRUE.  = phasefunction assumed to be constant
                    over the whole cloud volume with the
                    effective radius r_even

- r_even,        cloud droplet in micro m, which is assumed in
                    the whole cloud volume
                    (if even_cloud = 0, r_even will be ignored)

- cloud_file, file name of file with LES cloud data

- nx_LES,...  number of LES grid points in x direction

- dx_LES,...  gridsize of the LES grid in x direction

- nx_offset,  start to use cloud data from x = x(nx_offset)
  ny_offset,  start to use cloud data from y = y(ny_offset)

- cloud_albedo, activates calculation of cloud albedo

#####

SIMPLIFICATIONS

-----

&simplify only_z = .FALSE. /

        - only z,    works only for 1D data
                    calculations for x and y will be skipped

#####

OUTPUT

-----

        select output and filenames :
&save_photon_way  scatter_data = .FALSE.,
                    save_long   = .FALSE.,
                    details      = .FLASE.,
                    all_lambdas  = .FALSE.,
                    lambda_detail = 0.250,
                    all_photons  = .FALSE.,

```

```

photon_detail =      2004,
start_cycle   =      1,
end_cycle     = 2140000000,
skip_cycle    =      1 /

```

```

- scatter_data: save start, scattering and end position
- save_long:    scattering data is more detailed
- details:      cell by cell information

```

details and scatter\_data is saved for

```

- all_lambdas:  all wavelength
- lambda_detail: one specific wavelength in micro meter
- all_photons:  all photons
- photon_detail: one specific photon

- start_cycle: starting cycle to save details
- end_cycle   : end cycle for saving details
- skip_cycle  : cycles skipped between savings

```

```

&output SPECTRAL_WEIGHTING = .TRUE.,
CIE_WEIGHTING      = .FALSE.,
integration        = .FALSE.,
only_integrated    = .TRUE.,
z_output           = .TRUE.,
xy_output          = .TRUE.,
xyz_output         = .FALSE.,
x_lambda_output    = .FALSE.,
  x_normalized      = .FALSE.,
save_op_profiles   = .TRUE.,
mie_log_file       = .FALSE.,
abs_log_file       = .FALSE.  /

```

```

save_op_profiles: stores the profiles of the
                  scattering and absorption coefficients
spectral_output:  transforms transmission into
                  irradiance in W/(m^2 nm)
                  (resolution determined by solar spectrum)
z_output:         activates saving of profile results
xy_output:        activates saving of xy-results
xyz_output:       activates saving of 3D fields results as
                  -direct flux downward,
                  -diffusive flux downward,
                  -diffusive flux upward,
                  -absorbed flux
x_lambda_output:  activates output along x
                  with respect to the wavelength
x_normalized:     divide x_lambda_output by the value
                  in the middle of the x axis

mie_log_file:     stores calculation notes from mie calculation
abs_log_file:     stores calculation notes from absorption calc.

```

# Literaturverzeichnis

- [1] Albrecht, B. (1989)  
Aerosols, Cloud Microphysics and Fractional Cloudiness  
Science, 245, 1227-1230
- [2] Anderson, G. P., S. A. Clough, F. X. Kneizys, J. H. Chetwynd und E. P. Shettle, 1986  
AFGL Atmospheric Constituent Profiles (0 - 120 km)  
AFGL-TR-86-0110, AFGL (OPI), Hanscom AFB, MA 01736
- [3] Bates, D. R. (1984)  
Rayleighscattering by air  
Planet. Space Sci., Vol. 32, 785-790
- [4] Bodeker, G. E. und R. L. McKenzie (1996)  
An Algorithm for Inferring Surface UV Irradiance Including Cloud Effects  
Journal of Applied Meteorology, Vol. 35, 1860-1877
- [5] Bucholtz, A. (1995)  
Rayleigh-scattering calculation for the terrestrial atmosphere  
Applied Optics, Vol. 34, No. 15, 2765-2773
- [6] Burrows, J. P., A. Dehn, B. Deters, S. Himmelmann, A. Richter, S. Voigt, and J. Orphal (1999)  
Atmospheric Remote-Sensing Reference Data from GOME: 2. Temperature-Dependent Absorption Cross Sections of O<sub>3</sub> in the 231-794 nm Range  
Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer 61, 509-517
- [7] Cahalan, R. F., W. Ridgway, W. Wiscombe, S. Gollmer und H. Harshvardhan (1994)  
Independent pixel and Monte Carlo estimates of stratocumulus albedo  
Journal of the Atmospheric Sciences, Vol. 51, 3776-3790
- [8] Cahalan, R. F. (1999)  
I3RC-Homepage (Intercomparison of 3D Radiation Codes)  
<http://i3rc.gsfc.nasa.gov/>
- [9] Cairns, B., A. A. Lacis, und B. E. Carlson (2000)  
Absorption within inhomogeneous clouds and its parameterization in General Circulation Models  
J. Atmos. Sci., 57-62
- [10] Coohill, T. P. (1989)  
Ultraviolet action spectra and Solar Effectiveness Spectra for Higher Plants  
Photochem. Photobiol. Vol. 50, 451-457

- [11] Cullen, J. J., P. J. Neale und M. P. Lesser (1992)  
Biological Weighting Function for the Inhibition of Phytoplankton Photosynthesis by Ultraviolet Radiation  
Science, 258, 646-650
- [12] DIN 5030, Teil 2, 1982  
Spektrale Strahlungsmessung  
Strahler für spektrale Strahlungsmessungen, 1-3
- [13] Evans, K. F. (1993) Two-dimensional radiative transfer in cloudy atmospheres  
The spherical harmonic spatial grid method  
J. Atmos. Sci., 50, 3111-3124
- [14] Evans, K. F. (1998)  
The spherical harmonics discrete ordinate method for three-dimensional atmospheric radiative transfer  
J. Atmos. Sci., 55, 429-446
- [15] Fu, Q., S. K. Krüger, K. N. Liou (1995)  
Interaction of radiation and Convection in Simulated Tropical Cloud Clusters  
Journal of atmospheric sciences, Vol. 52, No. 9, 1310-1328
- [16] Fu, Q. (1996)  
An accurate parameterisation of the solar radiative properties of cirrus clouds in climate models  
Journal of Climate, 9, 2058-2082
- [17] Fu, Q., P. Yang und W. B. Sun (1998)  
An accurate parameterisation of infrared radiative properties of cirrus clouds in climate models  
Journal of Climate, 11, 2223-2237
- [18] Jacobson, M. Z. (1999)  
Fundamentals of atmospheric modelling, textbook  
Cambridge University press, 1-656
- [19] Hansen, J., M. Sato und R. Ruedy (1997)  
Radiative forcing and climate response  
J. Geophys. Res., 102, 6831-6864
- [20] Haywood, J. M. und O. Boucher (2000)  
Estimates of the direct and indirect radiative forcing due to tropospheric aerosols: A Review  
Rev. of Geophysics, 38, 513-543
- [21] Henyey, L. G. und J. L. Greenstein (1941)  
Diffuse radiation in the galaxy  
Astrophys. J., Vol. 93, 70-83
- [22] Homepage des HLRN  
[www.hlrn.de](http://www.hlrn.de)
- [23] Holm-Hansen O. (1997)  
Short- and long-term effects of UVA and UVB on marine phytoplankton productivity  
Photochem. Photobiol., Vol 65, 266-268

- [24] Hu, Y. X. und K. Stamnes (1993)  
An accurate parameterization of the radiative properties of water clouds suitable for use in climate models  
J. Climate, Vol 6, 728-742
- [25] Kassianov, E., T. P. Ackerman, R. T. Marchand und M. Ovtchinnikov (2001)  
Stochastic Radiative Transfer in Broken Clouds: Validation test  
Proceeding of the eleventh Atmospheric radiation measurement (ARM) Science Team meeting
- [26] Kato, S., T. P. Ackerman, J. H. Mather und E. E. Clothiaux (1999)  
The k-distribution method and correlated-k approximation for a shortwave radiative transfer model  
Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer Vol. 62, 109-121
- [27] Key, J., P. Yang, B. Baum und S. Nasiri (2002)  
Parameterisation of shortwave ice cloud optical properties for various particle habits  
J. Geophys. Res. - atmospheres 107 (D13): Art. No. 4181
- [28] Kneizys, F. X., D. C. Robertson, L. W. Abrun, P. Acharya, G. P. Anderson, L. S. Rothman, J. H. Chetwynd, J. E. A. Selby, E. P. Shettle, W. O. Gallery, A. Berg, S. A. Clough, L. S. Bernstein (1996)  
The MODTRAN 2/3 report and LOWTRAN 7 Model  
erstellt für: Phillips Laboratory, HanscomAFB, MA 01731.3010, Contract F 19628-91-C-0132  
auch verfügbar über: <http://imk-msa.fzk.de/MAS-public/Software-tools/Modtran/science/modrep.htm>
- [29] Kuchinke C., Fienberg K., Nunez M. (2004)  
The angular distribution of UV-B sky radiance under cloudy conditions: A comparison of measurements and radiative transfer calculations using a Fractal cloud model  
Journal of applied Meteorology, Vol. 43, No 5: 751-761
- [30] Kurucz, R. L. (1992)  
Synthetic infrared spectra, in Infrared Solar Physics  
IAU Symp., edited by D.M. Rabin and J.T. Jefferies  
Kluwer Acad., 1-154
- [31] Kylling A., A. F. Bais, M. Blumthaler, J. Schreder, C. S. Zerefos, E. Kosmidis (1998)  
Effect of aerosols on solar UV irradiances during the photochemical activity and solar ultraviolet radiation campaign  
Journal of Geophysical Research, Atmosphere 103 (D20), 26051-26060
- [32] Lenoble, J (2003)  
EDUCE work package 8 - modelling, Deliverable 8.7 Report on the importance of polarisation in calculations of radiance and irradiance available from EDUCE homepage: [www.muk.uni-hannover.de/martin/](http://www.muk.uni-hannover.de/martin/)
- [33] Lenoble, J. (1993)  
Atmospheric radiative transfer  
A. DEEPAK Publishing, 1-43 und 73-382

- [34] Liou, K. N. (2002)  
An introduction to Atmospheric Radiation  
International Geophysics Series, Volume 84, 1-347
- [35] Lohmann, U., Feichter, J. (eingereicht 2004)  
Global Indirect Aerosol Effects: A Review  
Atmos. Chem. Phys. Disc., 1-45
- [36] Marchuk, G. I., G. A. Mikhailov, M. A. Nazaraliev, R. A. Darbinjan, B. A. Kargin und B. S. Elepov (1980)  
The Monte Carlo methods in atmospheric optics  
Springer Verlag, 208, 1-27
- [37] Mayer, B., G. Seckmeyer, and A. Kylling (1997)  
Systematic longterm comparison of spectral UV measurements and UVSPEC modeling results  
Journal of Geophysical Research, 102(D7): 8755-8768
- [38] Mayer, B. (1999)  
I3RC phase 1 results from the MYSTIC Monte Carlo model  
extended abstract for the I3RC workshop, Tucson, Arizona  
verfügbar über <http://i3rc.gsfc.nasa.gov/> oder <http://www.libradtran.org>
- [39] Mayer, B. und A. Kylling (eingereicht 2004)  
The libRadtran software package for radiative transfer calculations: Description and example of use  
Atmos. Chem. Phys.  
Das Modell *libRadtran* und seine Dokumentation steht kostenlos unter <http://www.libradtran.org/> zur Verfügung.
- [40] McKee, T. B. und S. K. Cox (1974)  
Scattering of visible radiation by finite clouds  
J. Atmos. Sci., 31, 1885-1892
- [41] McKee, T. B. und J. T. Klehr (1977)  
Radiative effects of cloud geometry  
Proc. of Symposium on Radiation in the Atmosphere 1976,  
edit. von H.J.Bolle, Science Press, 217-219
- [42] McKinlay, A. F., B. L. Diffey (1987)  
A reference action spectrum for ultraviolet induced erythema in human skin  
In: Human exposure to UV radiation, risk and regulations  
edit. von W.F. Passchiers and B.F. Osnajakivic, Elsevier, 83-87
- [43] Kneizys, F. X., E. P. Shettle, W. O. Gallery, J. H. Chetwynd, L. W. Abreu, J. E. A. Selby, S. A. Clough und R. W. Fenn (1983)  
Atmospheric transmittance/radiance: Computer code LOWTRAN 6  
Rep. AFGL-TR-83-0187, 200-209
- [44] O'Hirok, W. und C. Gautier (1998)  
A three-dimensional radiative transfer  
model to investigate the solar radiation within a cloudy atmosphere  
J. Atmos. Sci., 55  
Part I, Spatial effects, 2162-2179  
Part II, Spectral effects, 3065-3076

- [45] Pierluissi, J. H. und G.-S. Peng (1985)  
new molecular transmission band models for LOWTRAN  
Opt. Eng., Vol 24(3), 541-547
- [46] Pierluissi J.H., C. E. Maragoudakis, R. Tehranimovahed (1989)  
new LOWTRAN band model for water-vapor  
Applied Optics, Vol. 28 (18), 3792-3795
- [47] Press, W.H. (1996)  
Numerical recipes in FORTRAN, Vol. 2  
Cambridge Univ. Press
- [48] Pope, R.M. und E.S. Fry (1997)  
Absorption spectrum (380-700 nm) of pure water II  
Integrating cavity measurements  
Applied Optics, , Vol. 36, (no.33): 8710-8723
- [49] Raasch, S. und D. Etling (1991)  
Numerical simulation of rotating turbulent thermal convection  
Beitr. Phys. Atmosph., 64, 185-189
- [50] Raasch, S. und M. Schröter (2001)  
A Large-Eddy Simulation Model performing on Massively Parallel Computers  
Meteorol. Z., 10, 363-372
- [51] Ray, P. (1972)  
Broadband Complex Refractive Indices of Ice and Water  
Appl. Opt. 11, 1836-1844
- [52] The atmosphere and ocean optical library REFLIB  
<http://atol.ucsd.edu/pflatau/refrtab/index.htm>  
→ water → REFWAT1.f
- [53] Ricchiazzi, P., S. Yang, C. Gautier, und D. Sowle (1998)  
SBDART: A Research and teaching software for plane-parallel radiative transfer in the earth's atmosphere  
Bulletin of the American Meteorological Society, Vol, 79, No. 10, 2101-2114
- [54] Sanchez, A., T. F. Smith, W. F. Krajewski (1994)  
A three-dimensional atmospheric radiative transfer model based on the discrete ordinates method  
Atmos.Res., Vol. 33, 283-308
- [55] Scheirer, R. (2002)  
Grimaldi User manual, Version 0.9  
[http://www.ifm.uni-kiel.de/fb/fb1/me/research/Projekte/RemSens/ ...](http://www.ifm.uni-kiel.de/fb/fb1/me/research/Projekte/RemSens/...SourceCodes/codes.html)  
...SourceCodes/codes.html
- [56] Schröter, M., S. Raasch and H. Jansen, 2005  
New Results on the Cell Broadening Problem during Cold Air Outbreaks from High Resolution Large-Eddy Simulations  
J. Atmos. Sci., 62, 2023-2032
- [57] Schumann, U., A. Dörnbrack und B. Mayer (2002)  
Cloud-shadow effects on the structure of the convective boundary layer  
Meteorologische Zeitschrift, Vol. 11, No. 4, 285-294



- [58] Seckmeyer, G und G. Bernhard (1993)  
Cosine error correction of spectral UV irradiance  
Atmospheric Radiation Europto Series, Vol. 2049, 140-151
- [59] Seckmeyer, G. (1997)  
Die genaue Messung und Simulation der solaren UV-Strahlung  
Habilitationsschrift, Technische Universität Ilmenau, 1-116
- [60] Seckmeyer, G, T. Martin und T. Ali (2004)  
European Database for UV Climatology and Evaluation  
Final report to the commission of the European communities  
Contract No. EVK2-CT-1999-00028
- [61] Segelstein, D. (1981)  
The Complex Refractive Index of Water  
M.S. Thesis, University of Missouri–Kansas City, 1-64
- [62] Setlow, R. B. (1974)  
The wavelength in sunlight effective in producing skin cancer: a theoretical analysis  
Proc. of the Nat. Acad. Sciences, Vol 71(9), 3363-3366
- [63] Smith, R. C. und J. J. Cullen (1995)  
Effects of UV radiation on phytoplankton  
Rev. Geophys. Suppl., 1211-1223
- [64] Smolskaia, I. (2001)  
Effect of inhomogeneous surface albedo on UV radiation in the Antarctic environment  
Doctor thesis, University of Tasmania, 1-147
- [65] Stamnes, K., S. C. Tsay, W. Wiscombe und K. Jayaweera (1988)  
Numerical stable algorithm for discrete-ordinate-method radiative transfer in multiple scattering and emitting layered media  
Appl. Opt., 27,(12), 2502-2509
- [66] Stratmann F., A. Kiselev, S. Wurzler, M. Wendisch, J. Heintzenberg, R. J. Charlson, K. Diehl, H. Wex, S. Schmidt (2004)  
Laboratory studies and numerical simulations of cloud droplet formation under realistic supersaturation conditions  
Journal of Atmospheric and oceanic technology, Vol. 21, Nr. 6, 876-887
- [67] Varnai, T. und R. Davies (1999)  
Effects of cloud heterogeneities on shortwave radiation: comparison of cloud-top variability and internal heterogeneity  
J. Atmos. Sci. 56, 4206-4224
- [68] Welch, R. M. und B. A. Wielicki (1984)  
Stratocumulus cloud field reflected fluxes: the effect of cloud shape  
J. Atmos. Sci. 41, 3085-3103
- [69] Welch, R. M. und W. G. Zdunkowski (1981)  
The effect of cloud shape on radiative characteristics  
Contr. Atmos. Phys 54, 482-491

- [70] Wiscombe, W. J. (1980)  
Improved Mie scattering algorithms  
Applied Optics, Vol.19, No.9, 1505-1509
- [71] Wiscombe, W. J. (1979)  
Mie Scatter Calculations; Advances in Technique and Fast, Vector-Speed  
Computer Codes  
(U.S.) National Centre for Atmospheric Research, 1-62 und A1-A22
- [72] Wuttke, S. (2004)  
Radiation Conditions in an Antarctic Environment  
PhD-thesis, Institute for Meteorology and Climatology, University of Hanover,  
Germany, 1-146
- [73] Yang, P., K. N. Liou, K. Wyser und D. Mitchell (2000)  
Parametrisation of the scattering and absorption properties of individual ice  
crystals  
J. Geophys. Res. 105 (D4), 4699-4718

## Danksagung

An erster Stelle möchte ich mich tausend mal bei meinem Vater bedanken, der mir mein Studium und einen wunderschönen Aufenthalt in Spitzbergen ermöglichte und immer für mich da war.

Ich möchte mich weiterhin herzlich bedanken bei:

Herrn Prof. Seckmeyer und Herrn Dr. Raasch, die das sehr interessante Thema meiner Diplomarbeit erdachten, mich während meiner Diplomarbeitsphase betreuten. Ich möchte ihnen auch dafür danken, dass sie mir die Teilnahme an zwei wissenschaftlichen Konferenzen, der QOS-Tagung in Griechenland und der IRS-Tagung in Süd-Korea, während meines Diploms ermöglichten.

Herrn Dr. Mayer, der mit seinen Simulationen und seinem Rat Wesentliches zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen hat.

Marcus Letzel, Michael Schröter und Heiko Jansen, die mir bei zahlreichen Fragen zu diversen Themen immer sehr freundlich weitergeholfen haben.

meinen Vater, meinen Bruder, meiner Freundin, Ulrike Spehr, Susanne Benze, Sebastian Dikty und Peer Röhner für Korrekturlesen, Tipps für LaTeX, Fortran, IDL und vielem mehr.

Sigried Wuttke, Sebastian Dikty und Merle Glandorf für eine angenehme Arbeitsatmosphäre im Herrenzimmer.

allen meinen Ersies und Gauss-AG Schülern, mit denen ich eine wirklich schöne Zeit hatte.

## Erklärung

Hiermit erkläre ich, dass ich die Diplomarbeit selbstständig angefertigt und keine anderen als die aufgeführten Hilfsmittel verwendet habe.

Hannover, im Februar 2005